

Universidad del Norte

Departamento de Ingeniería Mecánica



Diseño de un método híbrido de detección de fallas y reconocimiento de patrones para procesos industriales

TESIS

Para la obtención del título de:
Magíster en Ingeniería Mecánica

Melitsa Judith Torres Torres

Barranquilla, Colombia
Julio 2012

Universidad del Norte

Departamento de Ingeniería Mecánica



Diseño de métodos híbridos de detección de fallas y reconocimiento de patrones para procesos industriales

Para la obtención del título de:
Magíster en Ingeniería Mecánica

Melitsa Judith Torres Torres

Trabajo dirigido por:

Marco E. Sanjuán, PhD.

Barranquilla, Colombia
Julio 2012

Contenido

1.	Introducción	1
1.1.	Monitoreo en procesos automatizados	1
1.2.	Descripción general de la problemática.....	4
1.3.	Planteamiento específico del problema	6
1.4.	Objetivos	7
1.5.	Síntesis del documento	7
2.	Estado del Arte	9
2.1.	Detección de fallas	9
2.1.1.	Detección de fallas basadas en datos de proceso.....	10
2.2.	Reconocimiento de patrones	15
2.2.1.	Aprendizaje supervisado y no supervisado en monitoreo de procesos	17
3.	Diseño de la estrategia híbrida para detección de fallas	22
3.1.	Enfoque tradicional para detección de fallas.....	22
3.1.1.	Pre-procesamiento de datos	23
3.1.2.	Fase de entrenamiento	24
3.1.3.	Fase de detección.....	27
3.2.	Detección de fallas para procesos con estados de operación	27
3.2.1.	Identificación de estados de operación	31
3.2.2.	Fase de entrenamiento - SVM.....	32
3.2.3.	Pre-procesamiento de datos	37
3.2.4.	Fase entrenamiento – PCA	37
3.2.5.	Fase de detección: transición rígida.....	38
3.2.6.	Fase de detección: transición suave.....	39
4.	Validación y análisis de la estrategia híbrida para detección de fallas	41
4.1.	Caso de estudio	41
4.2.	Enfoque tradicional: fase de entrenamiento	43
4.3.	Enfoque híbrido: fase de entrenamiento.....	46
4.3.1.	Identificación de estados de operación	46

4.3.2.	Fase de entrenamiento - SVM.....	50
4.3.3.	Pre-procesamiento de datos	55
4.3.4.	Fase entrenamiento - PCA.....	56
4.4.	Fase de detección: Enfoque tradicional e híbrido.....	60
4.4.1.	Falla 1: Pérdida de calor en el reactor.....	60
4.4.2.	Falla 2: Taponamiento válvula línea 4.....	62
Conclusiones y recomendaciones		65
Bibliografía		68
Anexo		74

Lista de Figuras

Figura 1.1. Procedimientos en monitoreo de procesos	2
Figura 1.2. Estadístico SPE descriptor de operación de una caldera industrial.	4
Figura 1.3. Registros de proceso simulado de tratamiento de agua residuales.	5
Figura 2.1. Métodos de detección de fallas.	9
Figura 2.2. Técnicas de reconocimiento de patrones con aprendizaje supervisado.	15
Figura 2.3. Técnicas de reconocimiento de patrones con aprendizaje no supervisado.	16
Figura 3.1. Fases de implementación de PCA tradicional.	23
Figura 3.2. Visión general de estrategia para detección de fallas en procesos con estados de operación.	30
Figura 3.3. Entrenamiento SVM..	33
Figura 4.1. Diagrama de proceso como caso de estudio.....	41
Figura 4.2. Variables monitoreadas con estados de operación.	43
Figura 4.3. T^2 y Q para datos de entrenamiento X en enfoque de detección tradicional	45
Figura 4.4. Distancias entre neuronas vecinas en mapas auto-organizados de cada grupo de variables.....	49
Figura 4.5. Lógica de decisión para determinar estado actual de operación.	51
Figura 4.6. Resultados de clasificación para una secuencia de estados de operación.	53
Figura 4.7. Resultados de clasificación para zonas de transición.....	54
Figura 4.8. Estadísticos T^2 y Q para cada estado de operación.....	56
Figura 4.9. T^2 y Q para conjunto de datos X y transiciones rígidas.....	58
Figura 4.10. T^2 y Q para conjunto de datos X y tratamiento en transiciones.....	58
Figura 4.11. T^2 y Q para conjunto de datos X y mayor rangos en transiciones.....	59
Figura 4.12. Estadísticos de monitoreo para falla 1 y estado bajo.....	60
Figura 4.13. Estadísticos de monitoreo para falla 1 y estado medio.	60
Figura 4.14. Estadísticos de monitoreo para falla 1 y estado alto.	61
Figura 4.15. Estadísticos de monitoreo para modificación de falla 1 y estado bajo.....	61
Figura 4.16. Estadísticos de monitoreo para falla 2 y estado alto.	62
Figura 4.17. Estadísticos de monitoreo para falla 2 y estado medio.	62
Figura 4.18. Estadísticos de monitoreo para falla 2 y estado bajo.....	63
Figura A1. Sistema en estudio.	74

Lista de tablas

Tabla 4.1. Variables monitoreadas en el caso de estudio.....	42
Tabla 4.2. Verificación de propiedades componentes principales en enfoque tradicional.	45
Tabla 4.3. Coeficientes de correlación lineal entre las variables monitoreadas.....	47
Tabla 4.4. Grupos de variables con coeficientes de correlación similares.....	47
Tabla 4.5. Relación de centroides de estados de operación por grupo de variables.	48
Tabla 4.6. Resultados de clasificación de dos SVM para cada estado de operación.	51
Tabla 4.7. Desempeño de SVM's basado en la tasa de error de clasificación.	52
Tabla 4.8. Parámetros de fronteras de decisión de clasificadores de estados de operación.	53
Tabla 4.9. Rangos de operación normal basados en funciones de frontera de decisión. ...	54
Tabla 4.10. Verificación de propiedades componentes principales en enfoque híbrido. ...	57
Tabla A1. Parámetros de operación del sistema de Figura A1.....	75

1. Introducción

Desde aproximadamente 1960 la automatización de la operación de los procesos industriales ha incrementado de manera progresiva, favorecida por los crecientes requerimientos de optimización e incremento de la calidad del producto así como la independencia de la presencia humana, reduciendo costos por cantidad de operadores [1]. A su vez esto ha conllevado a que la industria cuente con plantas cada vez más complejas, de gran escala y altamente instrumentadas, lo que se refleja en una gran cantidad de datos de operación disponibles. En el monitoreo de estas plantas esta tendencia ofrece oportunidades para la reducción del impacto de comportamientos inusuales en el proceso producto de anomalías en el sistema, temática tratada en esta investigación.

1.1. Monitoreo en procesos automatizados

Es posible dividir la automatización de procesos en tres grupos [1]: Control, el nivel bajo en línea directa con el proceso; Supervisión, como la etapa intermedia; y Acciones Globales como coordinación, optimización y administración en un nivel superior. En el nivel inferior se encuentran lo que se conoce como Controladores de Proceso Estándar (Controladores PID, Control predictivo basado en modelos-MPC, etc.) los cuales son los responsables de mantener la operación del proceso en condiciones satisfactorias mediante la compensación de los efectos por cambios en el proceso y en perturbaciones. Sin embargo, existen cambios que este tipo de controladores no pueden manejar adecuadamente como son: cambios en los parámetros de proceso, cambios en los parámetros de las perturbaciones, problemas con actuadores y problemas con sensores, mayormente [2]. Estos cambios son considerados como fallas, en donde una falla no es más que una desviación no permitida o deseada de al menos una propiedad característica del sistema de su condición normal o usual de operación [1].

Ante la presencia de fallas en un proceso automatizado es posible emplear procedimientos como los presentados en la Figura 1.1 en miras de continuar su operación en las condiciones de diseño. De acuerdo con esto, estas fallas deben ser detectadas (ocurrió una falla), identificadas (variables relevantes causantes de la falla), diagnosticadas (determinar tipo de falla, su localización, tiempo y magnitud) y removidas (volver operación a condición normal), tareas asociadas al monitoreo de procesos y abordadas desde el Control Estadístico de Procesos (SPC) mediante actividades de detección

principalmente. Para ello, es necesario el uso de medidas, provenientes directamente del sistema en estudio, que representen su estado o comportamiento de modo que puedan ser comparadas contra indicadores que describan la operación normal del sistema y determinar si su condición actual corresponde a una condición atípica o a una usual. Debido a que cada medida caracteriza a una falla de manera diferente, existirán medidas más sensibles a algunas fallas que a otras por lo que el uso de múltiples medidas es una opción atractiva, considerando las características del proceso y de las fallas a detectar para su escogencia [2].

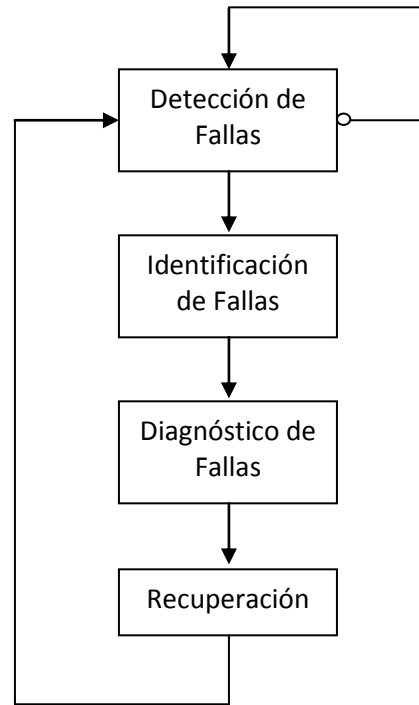


Figura 1.1. Procedimientos en monitoreo de procesos (adaptado de [2]).

De acuerdo con la forma de obtención de las medidas para realizar actividades de monitoreo de procesos es posible identificar tres enfoques [3]. Un enfoque considera medidas obtenidas a partir de modelos analíticos, caracterizados por brindar fácil interpretación de los datos y de sus desviaciones, los cuales usan relaciones matemáticas entre las variables de proceso en forma de ecuaciones para su definición y son aplicados principalmente cuando se tiene información abundante y sistemas con pocas entradas, salidas y estados. Si se cuenta con pocos sensores o modelos imprecisos del proceso el enfoque a considerar es el basado en conocimiento el cual, aplicado igualmente a sistemas con pocas entradas, salidas y estados, pretende utilizar modelos cualitativos para describir el proceso. En el caso de sistemas de gran escala con numerosas variables altamente correlacionadas entre sí, un modelo preciso y detallado presentaría dificultades en su desarrollo y un modelo cualitativo demandaría mucho esfuerzo por lo que el

enfoque basado en datos obtenidos directamente del sistema es el indicado. Este tercer enfoque aprovecha la disponibilidad de información operativa normal de los procesos para establecer medidas y detectar e identificar fallas cuando éstas difieran significativamente de sus valores originales. Al ser medidas basadas en datos presentan una alta dependencia de datos con calidad y en cantidad, dado que a pesar de ser un enfoque altamente beneficiado con la creciente instrumentación de los procesos industriales sólo una porción de los datos disponibles son realmente útiles.

Debido a que es común encontrar procesos cada vez más complejos, con crecientes interacciones entre sus variables, numerosos estados transitorios y altamente instrumentados se hace énfasis en el análisis de las técnicas de detección de fallas basadas en datos. Dentro de este tipo de técnicas se encuentra el método tradicional de límite de detección, el cual compara las observaciones de cada variable con su respectivo límite definido y cuando éste es superado emite una señal de alarma. Típicamente se utiliza la carta Shewhart la cual por su estructura de funcionamiento puede presentar tasas inadecuadas de falsas alarmas (al usar límites ajustados) y detecciones omitidas (con límites separados), siendo mejoradas con la implementación de medidas que utilicen observaciones en múltiples instantes de tiempo, como las cartas CUSUM y EWMA, a costa de incrementar el tiempo de detección. Si bien es cierto se considera relativamente sencillo de implementar y comprender el funcionamiento de estas técnicas, no utilizan información de otras variables para establecer el umbral empleado omitiendo la correlación existente entre las variables en observación [3]. A saber que generalmente los datos de proceso son altamente correlacionados estas técnicas presentan baja sensibilidad a fallas en el sistema y poco robustas al no considerar la correlación serial, si se quiere evadir los retrasos en la detección. Es aquí donde las técnicas basadas en estadística multivariada se vuelven atractivas en miras de considerar la correlación espacial entre las variables.

Dentro de las técnicas multivariadas más populares para detección de fallas basadas en datos aplicadas a procesos industriales se pueden identificar: el Análisis de Componentes Principales (PCA), Mínimos Cuadrados Parciales (PLS), el Análisis de Componentes Independientes (ICA) y el Algoritmo Basado en Análisis de Variables Canónicas (Algoritmo CVA). Para aplicar cada una de las técnicas se debe tener en cuenta principalmente la calidad y cantidad de información disponible así como las características del proceso, la relación existente entre las variables, cumplimiento de supuestos estadísticos en las etapas de construcción de los modelos y las particularidades de la técnica dado que atacan el mismo objetivo pero con distintos enfoques, entre otras. Para detección, en cada técnica basada en datos de una u otra manera se puede identificar un modelo

descriptor de la condición normal de operación, el empleo de estadísticos para ser comparados con un umbral de detección y evaluar el estado del proceso en un tiempo determinado. Esto se aprecia en la Figura 1.2 mediante la implementación de PCA multi-escala a un conjunto de datos de una caldera industrial [4]. Se puede observar el comportamiento normal del proceso en muestras en donde el estadístico multivariado, en este caso el Error de Predicción Cuadrático (SPE), se encuentra por debajo de su umbral de detección. En el momento en que este umbral es superado indica que hay una falla presente y persistente en el proceso, dado el comportamiento observado.

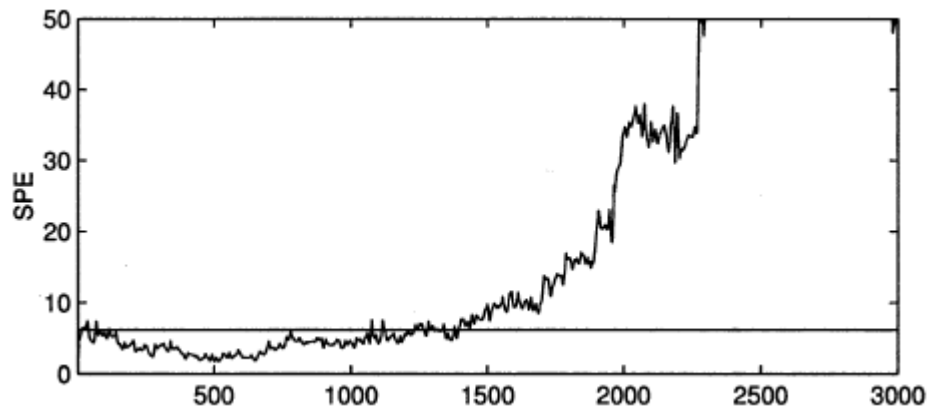


Figura 1.2. Estadístico SPE descriptor de operación de una caldera industrial [4].

El empleo de estadísticos multivariados para describir la condición de operación del proceso refleja su utilidad en gráficas univariadas, como la Figura 1.2, construidas con base en información n -dimensional obtenida de las señales de instrumentación. Esto permite que en las actividades de monitoreo la atención se centre en una gráfica como descriptor global del sistema en vez de múltiples de éstas asociadas a cada señal de proceso.

1.2. Descripción general de la problemática

Si bien la obtención de modelos derivados de las técnicas multivariadas basadas en datos puede incluir la correlación espacial y serial en el tratamiento de las variables de proceso, es posible que exista información en el proceso a considerar de manera complementaria en miras de mejorar la detección de condiciones atípicas. Este es el caso de los procesos industriales que involucran patrones de comportamiento en su operación, e incluyen condiciones variantes de carga.

La aplicación de técnicas para detección de fallas en este tipo de procesos resulta ventajosa en la medida que sirvan de apoyo a los operadores para percibir condiciones atípicas cuando éstas se estén generando y no cuando tengan un efecto perjudicial significativo en la operación del proceso. Podría considerarse como fallas una creciente sobrecarga energética en un nodo en particular de una red eléctrica o más abruptas como un corto circuito y desconexiones por problemas en la infraestructura; fugas en las tuberías de agua o gas natural, cierres intempestivos de válvulas, mal funcionamiento de sensores y actuadores en general, consumo desmesurado y atípico, entre otros. La oportuna detección de estas anomalías se ve reflejado en un adecuado manejo de las programaciones de mantenimiento preventivo, un uso razonable de la energía y recursos naturales, un apoyo al operador del centro de control para enfocar mayor atención en los momentos pertinentes, entre otros, lo que conlleva a una reducción en los costos y un incremento en la seguridad de las operaciones.

Para alcanzar estos objetivos, la información asociada a los patrones de comportamiento en la operación de procesos puede extraerse y ser utilizada para efectos de detección de fallas. Este comportamiento se ejemplifica en el proceso simulado de tratamiento de aguas residuales el cual es afectado por dos semanas de tormenta, la primera alrededor de la muestra 850 y la segunda alrededor de la 1050, como se muestra en la Figura 1.3 [5].

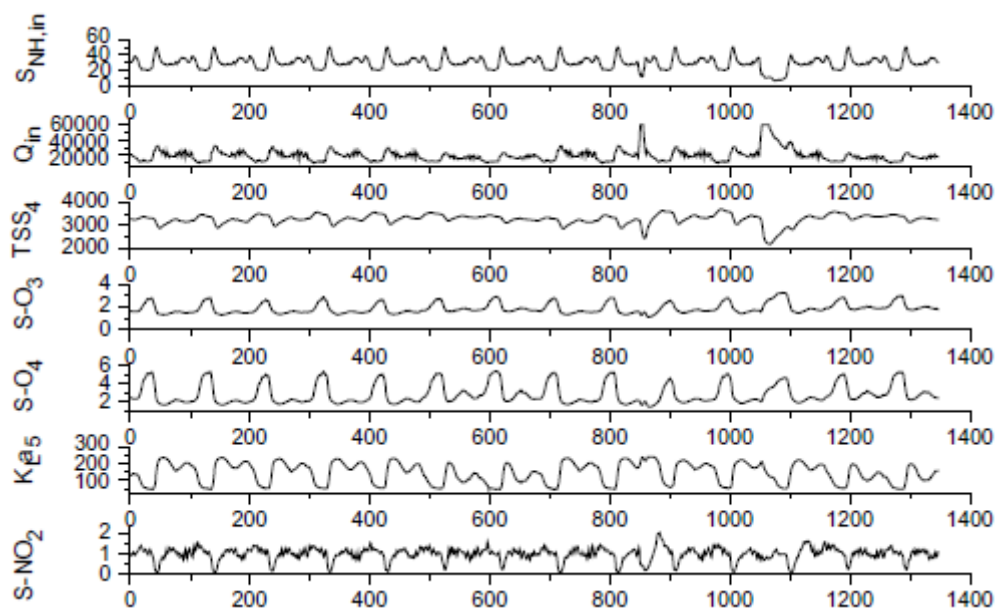


Figura 1.3. Registros de proceso simulado de tratamiento de agua residuales [5].

De la Figura 1.3 se aprecia que el patrón de comportamiento de las variables descriptoras del proceso simulado se ve afectado por las semanas de tormenta, como por ejemplo el

aumento de la tasa promedio del flujo de agua (Q_{in}). Esta tendencia que se observa en la operación de procesos puede ser utilizada para detección de fallas cuando éstas ocurren en un estado especificado dentro del patrón.

1.3. Planteamiento específico del problema

El caso particular de procesos que involucran patrones de operación presenta ciertas desventajas cuando se aplican técnicas de detección de fallas basadas en datos. Estas técnicas se basan en el monitoreo de la variabilidad de los datos y cuando se detectan cambios significativos en ésta se dice que una falla ha ocurrido. Cuando la condición normal de operación presenta patrones de comportamiento la variabilidad que se toma como referencia incluye todos los estados de operación dentro del patrón, lo que conduce a una pérdida en la sensibilidad de detección en comparación a si se monitorea la variabilidad en cada estado de operación de manera independiente.

En el proceso presentado en la Figura 1.3 si la variable de flujo tuviera un tratamiento independiente y paralelo al análisis global del sistema, es posible que mediante la detección del cambio en su patrón de operación arrojará tiempos de detección menor en comparación al resultado global. Por otra parte la información de patrones de operación puede ser útil al momento de determinar si una falla existe o no cuando se consideran procesos con patrones de consumo, por ejemplo. Este es el caso de procesos con sistemas de transporte en donde dos escenarios se obtienen si una señal proveniente de un sensor de presión disminuye su valor dado un consumo alto o dado un consumo bajo. El primer caso correspondería a un comportamiento normal del sistema dado que se presentó una disminución en la presión de suministro producto de un incremento en la demanda de consumo. En el segundo caso se podría considerar que la disminución de presión es ocasionada por una fuga en el sistema de transporte. Esta dependencia del estado de consumo del proceso hace necesario el estudio de detección de fallas orientado a considerar estos patrones en miras de una correcta detección. En este contexto, si se hace a un lado la información de patrón de consumo puede conllevar a detecciones fallidas, paradas no programadas innecesarias y por consiguiente pérdidas económicas en la operación del sistema.

Debido a este tipo de falencias en procesos que involucran patrones de operación se presenta esta investigación como alternativa de solución enfocada a evaluar la detección de fallas en estos procesos con una dependencia del estado actual dentro del patrón de operación. Esto equivale a la creación de modelos independientes descriptores del proceso pero considerando que éste presenta estados de operación diferenciables y

estacionales en el tiempo. Por esta razón, se hace necesario el diseño de métodos híbridos que aborden esta problemática desde el punto de vista de detección multivariada de fallas por ser un procedimiento atractivo en el monitoreo de procesos así como desde el reconocimiento de patrones para la creación de modelos base y posterior identificación de estado de operación como soporte a la detección.

1.4. Objetivos

Objetivo General

Diseñar un método híbrido de detección de fallas basada en datos y reconocimiento de patrones para determinar en procesos industriales condiciones atípicas dependientes del estado de operación de una o más variables que involucren patrones estacionales.

Objetivos Específicos

- Diseñar una estrategia para determinar el estado de operación actual del proceso basada en la identificación y selección de variables con patrones estacionales mediante la aplicación de técnicas estadísticas y de reconocimiento de patrones.
- Diseñar una estrategia de detección de fallas aplicada a procesos con patrones de operación que determine la condición del sistema de acuerdo con su dependencia al estado de operación y considerando transiciones rígidas entre modelos base.
- Diseñar una estrategia para el tratamiento en zonas de transición de los modelos base para determinar una referencia suave del estado de operación en la definición de la condición de operación del sistema.

1.5. Síntesis del documento

Se ha presentado en este capítulo introductorio aspectos generales relacionados con el monitoreo de procesos. En particular, se ha destacado la pertinencia de métodos de detección de fallas basados en datos debido a su aplicabilidad en procesos complejos altamente instrumentados. Se presta especial atención a los inconvenientes presentados en procesos que involucran patrones de operación y cuya condición de falla tiene una dependencia directa de su estado dentro de ese patrón, así como aspectos de sensibilidad a la detección por no considerar información de estados de proceso. En miras de abordar estas problemáticas, se presenta en el capítulo 2 una visión general de las técnicas de detección de fallas basadas en datos aplicadas en la literatura, así como de técnicas de

reconocimientos de patrones que podrían emplearse para la definición de estados de operación. Por su parte el proceso de diseño de la estrategia híbrida de detección de fallas que contempla la definición de estados de operación del proceso, así como transiciones rígidas y suaves entre estos estados se expone en el capítulo 3. Posteriormente en el capítulo 4 cada método expuesto es evaluado en un procedimiento de validación y análisis de desempeño, para presentar finalmente en el capítulo 5 las conclusiones de esta investigación y los trabajos futuros posibles a desarrollar.

2. Estado del Arte

Diversos enfoques se han contemplado para monitoreo de procesos y en especial para detección de fallas. En particular, para abordar la problemática asociada a la dependencia de la condición de falla del proceso a su estado de operación se orienta esta investigación al empleo de métodos híbridos que involucren técnicas de detección basadas en datos y reconocimiento de patrones. Para ello, se presenta una visión general de las anteriores técnicas aplicadas en la literatura en miras de proveer una contextualización sobre sus características y aplicabilidad.

2.1. Detección de fallas

En las actividades de detección de fallas, modelos basados en conocimiento, analíticos y basados en datos como los de la Figura 2.1 han sido empleados para este propósito. Del lado de detección con una sola señal, las variables son monitoreadas de manera independiente sin considerar correlaciones entre ellas. En el caso de los sistemas de transporte de gas modelos analíticos como los balances volumétricos y modelos de estimación de estados han sido usados para detección de fallas [6], así como modelos de sistemas con parámetros lineales variantes [7] e integrados con lógica difusa para modelar ciertos estados de los procesos [8].

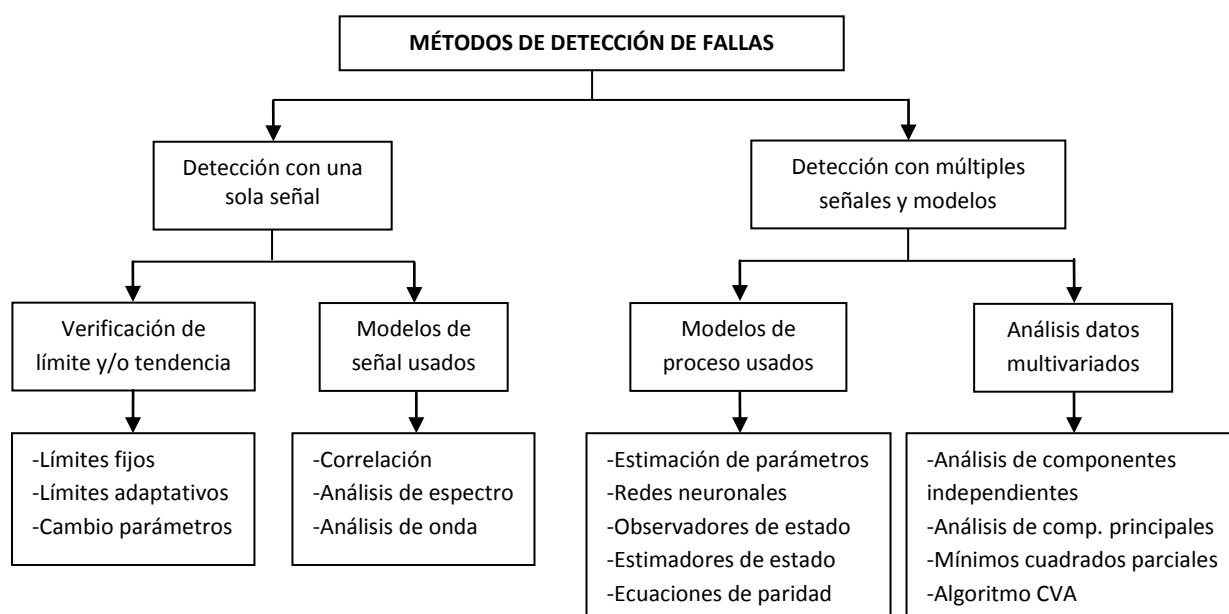


Figura 2.1. Métodos de detección de fallas (adaptado de [1]).

En el campo de la energía eléctrica las implementaciones van orientadas más a diagnóstico empleando técnicas inteligentes para determinar las características de las fallas, mientras que para detección se limitan típicamente a interpretar el sistema de protección automática de la red constituida principalmente por circuitos interruptores que se disparan ante eventos anómalos [9], [10]; también se ha incursionado en detección de fallas en sistemas fotovoltaicos reduciendo su campo de observación a parámetros como la eficiencia para determinar la ocurrencia de las mismas [11] así como en transformadores de potencia específicamente [12], [13].

En lo concerniente a las redes de distribución de agua para consumo se ha considerado las fallas típicas como fugas, tuberías bloqueadas, funcionamiento erróneo en bombas y válvulas, resumidas como Fallas Hidráulicas así como también las Fallas de Calidad considerando la contaminación por ciertas sustancias o abuso de desinfectantes, orientando el análisis principalmente al diagnóstico de estas fallas [14]. Para detección, se han realizado implementaciones para múltiples fugas en la tubería con métodos basados en modelos analíticos considerando transitorios en la presión cercana al punto de fuga, observadores no lineales [15], [16] así como modelos híbridos analíticos y basados en datos para detectar y diagnosticar respectivamente fugas en las redes de distribución de agua [17].

2.1.1. Detección de fallas basadas en datos de proceso

Las técnicas multivariadas basadas en datos para detección de fallas son atractivas por utilizar información directamente del proceso y considerar tanto la correlación serial de cada variable, como la correlación espacial entre todas las variables.

Análisis de Componentes Principales – PCA

Entre las más populares dentro del grupo de técnicas de detección de fallas basadas en datos aplicadas en la literatura se encuentra el Análisis de Componentes Principales [2]. PCA es una técnica estadística multivariada usada ampliamente para monitoreo de procesos industriales, caracterizada por producir una representación de los datos en dimensión reducida conservando la estructura de correlación entre las variables de proceso, además de ser óptima en capturar la variabilidad en los datos. Esto implica un manejo mejorado de la información de proceso dado que se trabaja con menos datos que generalizan el comportamiento y variabilidad del proceso en contraste con usar la dimensionalidad entera del espacio de observación. Estas particularidades de PCA se logran mediante la determinación de un conjunto de vectores ortogonales, llamados

vectores de carga, ordenados por la cantidad de variabilidad en sus direcciones. Para esto se hace uso de descomposiciones en valores singulares de la matriz de datos, así como descomposiciones en eigenvalores de la matriz de covarianza de los datos como método alternativo.

Con el objetivo de capturar las variaciones de los datos mientras se minimiza el efecto del ruido aleatorio que corrompe la representación de PCA, se retienen los vectores de carga correspondientes a los α valores singulares mayores. Esto permite separar el espacio de observación en dos subespacios, uno que capture la tendencia sistemática del proceso y otro relacionado al ruido aleatorio. Así como en las cartas de monitoreo univariadas, para efectos de detección es posible verificar ciertas propiedades en cada variable de la matriz objetivo de dimensión reducida de datos de prueba (subespacio que describe tendencia actual del proceso) y si éstas no se satisfacen indica que los datos de prueba corresponden a condiciones de operación diferente a los datos de entrenamiento.

Por otro lado hay aplicaciones en donde la mayoría de variabilidad de proceso puede ser capturada en dos o tres dimensiones, casos en donde ésta puede ser visualizada y asistir a los operadores en la interpretación de la tendencia del proceso [2]. Sin embargo para casos distintos en donde se obtienen más de tres dimensiones y dado que ciertas fallas afectan inicialmente uno de los subespacios descritos es posible aplicar medidas a cada subespacio, tales como los estadísticos multivariados T^2 y SPE respectivamente, y monitorear el estado del proceso con mayor sensibilidad usando gráficos similares a los univariados pero con base en estos estadísticos multivariados y en umbrales de operación normal. Este es el caso de la caldera industrial presentada en la sección 1.1 del capítulo introductorio [4].

En adición a este caso, considerando el proceso simulado de tratamiento de aguas residuales se encuentra la aplicación de Kernel PCA para capturar las propiedades no lineales y características dinámicas del sistema [18], así como el empleo de Redes Neuronales en conjunto con PCA para ejercer en tiempo real las actividades de monitoreo de procesos en este tipo de plantas [19]. PCA ha sido empleado de igual forma para detectar condiciones atípicas en un simulador de máquina de papel considerando subconjuntos de datos de entrenamiento que involucran patrones de operación pero abordando el problema con un análisis especial y optimizado de los residuales del modelo [20]. Sobre aplicaciones en tendencias de comportamiento se evidencia el uso de PCA como técnica de reducción de dimensionalidad y sus ventajas en el manejo de información en el espacio reducido mientras que la técnica de Análisis de Tendencia Cualitativo se emplea en el proceso simulado Tennessee Eastman (TE) para diagnóstico de

fallas [21]. La consideración de patrones para detección de fallas se relaciona con la implementación de PCA en un proceso de fundición de aluminio [22]. En este proceso los patrones se asocian a la tasa de suministro de aluminio como variable de entrada. La información de patrones es usada para determinar el tamaño del conjunto de datos a analizar, no realiza un análisis individual de variabilidad dentro del patrón. A este conjunto de datos se aplica PCA y se determina la condición atípica o normal del proceso. En este enfoque, debe esperarse que transcurra un período completo del patrón para realizar el análisis de detección.

Análisis de Componentes Independientes – ICA

Muchas de las variables monitoreadas en los procesos no son independientes, sus mediciones pueden llegar a ser combinaciones de variables independientes que no son medidas directamente. El Análisis de Componentes Independientes (ICA) puede extraer estos componentes de datos estadísticamente multivariados mediante la definición de un modelo generativo. En este modelo las variables resultantes se consideran mezclas de variables latentes (componentes independientes de los datos en observación, mutuamente independientes y no gaussianas) desconocidas cuya matriz de mezcla se desconoce igualmente. ICA, entonces, pretende extraer de los datos multivariados sus componentes independientes y la matriz de mezcla de coeficientes [23].

ICA difiere de PCA principalmente porque asume que los datos provienen de fuentes que siguen una distribución no gaussiana. Además considera estadísticos de orden superior para reducir dependencias, a diferencia de PCA que sólo considera independencia respecto a la media y la varianza [23]. Sin embargo, sigue la tendencia de PCA al considerar estadísticos multivariados de detección para describir el comportamiento sistemático y no sistemático del proceso. Utiliza los estadísticos I^2 e I_e^2 junto a SPE , análogos a T^2 y SPE en el caso de PCA, para cada subespacio [23]. El cambio en el uso de los estadísticos se sustenta en que el T^2 y SPE asumen funciones de densidad de probabilidad de las variables latentes que siguen distribución gaussiana y por las características de ICA el uso de éstos pueden arrojar resultados inadecuados y erróneos. Una alternativa para definir los límites de condición normal de operación es el uso de estimaciones de densidad empíricas no paramétricas empleando extracciones de Kernel [23].

Aplicaciones de ICA en el proceso simulado de tratamiento de aguas residuales para detección de fallas de fuentes no gaussianas se ve reflejado en [5], así como alternativas mejoradas de ICA denominada Kernel ICA se aplican igualmente en este proceso simulado

y al proceso simulado Tennessee Eastman (TE), mostrando sus ventajas respecto al método ICA tradicional cuando se lidian con no linealidades en el sistema [25]. ICA también es usado en el proceso simulado TE como etapa de pre-procesamiento para la transformación de variables de entrada y posterior aplicación de métodos de detección de datos atípicos como el Factor Atípico Local, modificando el esquema de los umbrales y estadísticos típicos usados [26]. Por su parte PCA es usado en conjunto con ICA como etapa de pre-procesamiento de datos asociados a parámetros identificadores de operación en sistemas de automoción para efectos de detección y luego diagnóstico con técnicas de agrupamiento [27]. Otras propuestas para mejorar la capacidad de detección de la técnica se reflejan en los desarrollos de C. Hsu et al. [28] en donde los estadísticos de ICA son considerados entradas a un bloque clasificador basado en máquinas de vectores de soporte para detectar condiciones atípicas en simulaciones en modelo de un sistema multivariado dinámico.

Mínimos Cuadrados Parciales – PLS

De la mano de PCA, Mínimos Cuadrados Parciales es otra técnica de reducción de dimensionalidad que a su vez pretende maximizar la covarianza entre un bloque predictor (matriz X) y un bloque predicho (matriz Y) para cada componente del espacio reducido. El propósito de PLS es determinar los vectores de carga y objetivo los cuales están correlacionados con Y mientras describen una gran cantidad de variación en X.

La definición del bloque predictor depende de la aplicación. Por ejemplo, en control de calidad se selecciona la matriz Y de modo que contenga características de calidad en el producto y que la matriz X contenga las variables de proceso. Si es diagnóstico de fallas, esta matriz Y indica clases falla y sus variables indican pertenencia o no pertenencia a una clase en particular. En el caso de detección de fallas, existe una estrecha similitud entre PCA y PLS respecto a la descomposición de la matriz X en vectores de carga y objetivo por lo que es posible emplear las mismas aproximaciones y medidas en términos de detección del caso de PCA. La diferencia radica en que los vectores de carga en PCA son ortogonales y en PLS éstos presentan una ligera rotación en miras de capturar una relación mejorada entre los dos bloques descritos [3].

La utilidad de los métodos de detección de fallas basadas en datos se ve reflejada en el empleo de técnicas como PCA y PLS para establecer modelos de operación normal de una planta de energía como alternativa al desarrollo de un observador de estados basado en un modelo simplificado de balance de energía [29]. PLS también ha sido usada para la etapa de detección de fallas en conjunto con Análisis Discriminante de Fisher para la etapa

de diagnóstico en un sistema acoplado de dos tanques considerando fallas en actuadores y sensores [30]. Análogamente, PLS ha sido empleada para un sistema de tres tanques acoplados pero ahora considerando modelos independientes para cada tanque y con especificaciones que hacen el desarrollo dependiente del proceso en estudio [31].

Algoritmo basado en Análisis de Variables Crónicas – Algoritmo CVA

Dentro de los avances desarrollados en la teoría de identificación de sistemas para cuantificar la correlación serial se encuentran los algoritmos de subespacio, los cuales producen variables de estado directamente de los datos sin necesidad de la parametrización a priori del espacio de estado. Dentro de los algoritmos de subespacio más populares se encuentra el Algoritmo Basado en Análisis de Variables Canónicas. El Análisis de Variables Canónicas (CVA) es una técnica de reducción de dimensionalidad aplicada en análisis estadístico multivariado que incluye la selección de pares de variables en los conjuntos de datos de entradas y salidas dado que se maximice una medida de correlación entre ellos. Como la gran mayoría de los algoritmos de subespacio, el Algoritmo CVA también usa la descomposición en valores singulares y resulta atractivo dado que CVA es una técnica que guarda una estrecha relación con PCA y PLS por lo que estadísticos basados en esta técnica pueden emplearse con CVA [3].

En particular, para detección de fallas es posible utilizar el estadístico T^2 en las variables canónicas obtenidas producto de la descomposición en valores singulares generalizada para el Algoritmo CVA. Sin embargo, aplicar este estadístico a todo el conjunto de variables canónicas puede resultar en un incremento considerable en el ruido. Para esto, se aplica un procedimiento análogo al realizado por PCA en donde se aplica el estadístico T^2 para el subespacio descriptor del proceso y el estadístico SPE para el subespacio descriptor del ruido. De este modo se replantea la estructura de solución del estadístico T^2 y se divide en un T_s^2 que mide la variación al interior del espacio de estado y en un T_r^2 que mide la variación por fuera del espacio de estado. Una violación al T_s^2 indica que los estados están fuera de control y una violación de T_r^2 indica que las características en la medición de ruido han cambiado o que nuevos estados se han creado en el proceso. El estadístico SPE puede usarse para complementar al T_r^2 cuando se aplica al vector residual del modelo en espacio de estado y ambos miden esencialmente el ruido de proceso [3].

La implementación de estos índices se ve reflejada en el empleo del Algoritmo CVA en simulaciones de un reactor continuamente agitado para detección de fallas en sensores e identificación del proceso [32]. Así mismo, el proceso TE ha sido empleado para evaluar las características del Algoritmo CVA en conjunto con PCA y PCA dinámico en donde se

refleja que los índices del espacio residual presentan mayor sensibilidad que en el espacio descriptor de la tendencia del proceso, pero además presentan mayor tasa de falsas alarmas liderado por el Algoritmo CVA [33]. En este proceso simulado también se han evaluado límites basados en estimaciones de densidad Kernel usados con CVA y aplicados en conjunto con PCA dinámico y PLS dinámico para abordar sus características no gaussianas obteniendo resultados similares en la mayoría de los casos [34]. También, análisis comparativos de métodos de identificación son examinados en este proceso en donde CVA presenta mejores resultados por su precisión frente a otros algoritmos de subespacio y técnicas de regresión, así como también es destacado por su uso para detección de fallas mediante el Algoritmo CVA [35].

2.2. Reconocimiento de patrones

El procedimiento de reconocer un patrón en, por ejemplo, señales de elementos de instrumentación, una imagen, un texto, una grabación de voz, etc., implica típicamente segmentación o separación del objeto de interés, extracción de características y conformación de descriptores que definan al objeto de modo que pueda ser clasificado posteriormente dentro de un grupo categorías dependiendo de la aplicación. Dentro de la amplia gama de técnicas de este tipo estudiadas en la literatura dos grandes grupos pueden identificarse [36]: de aprendizaje supervisado si la relación entre los datos y la clasificación es conocida a priori, y de aprendizaje no supervisado si no se cuenta con esta relación, presentadas en las Figuras 2.2 y 2.3 respectivamente.

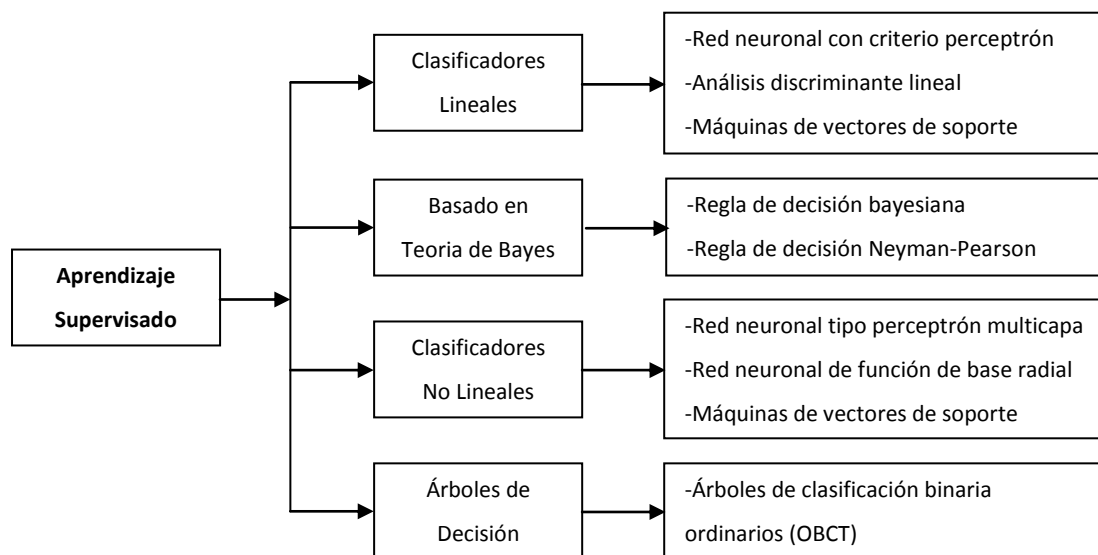


Figura 2.2. Técnicas de reconocimiento de patrones con aprendizaje supervisado.

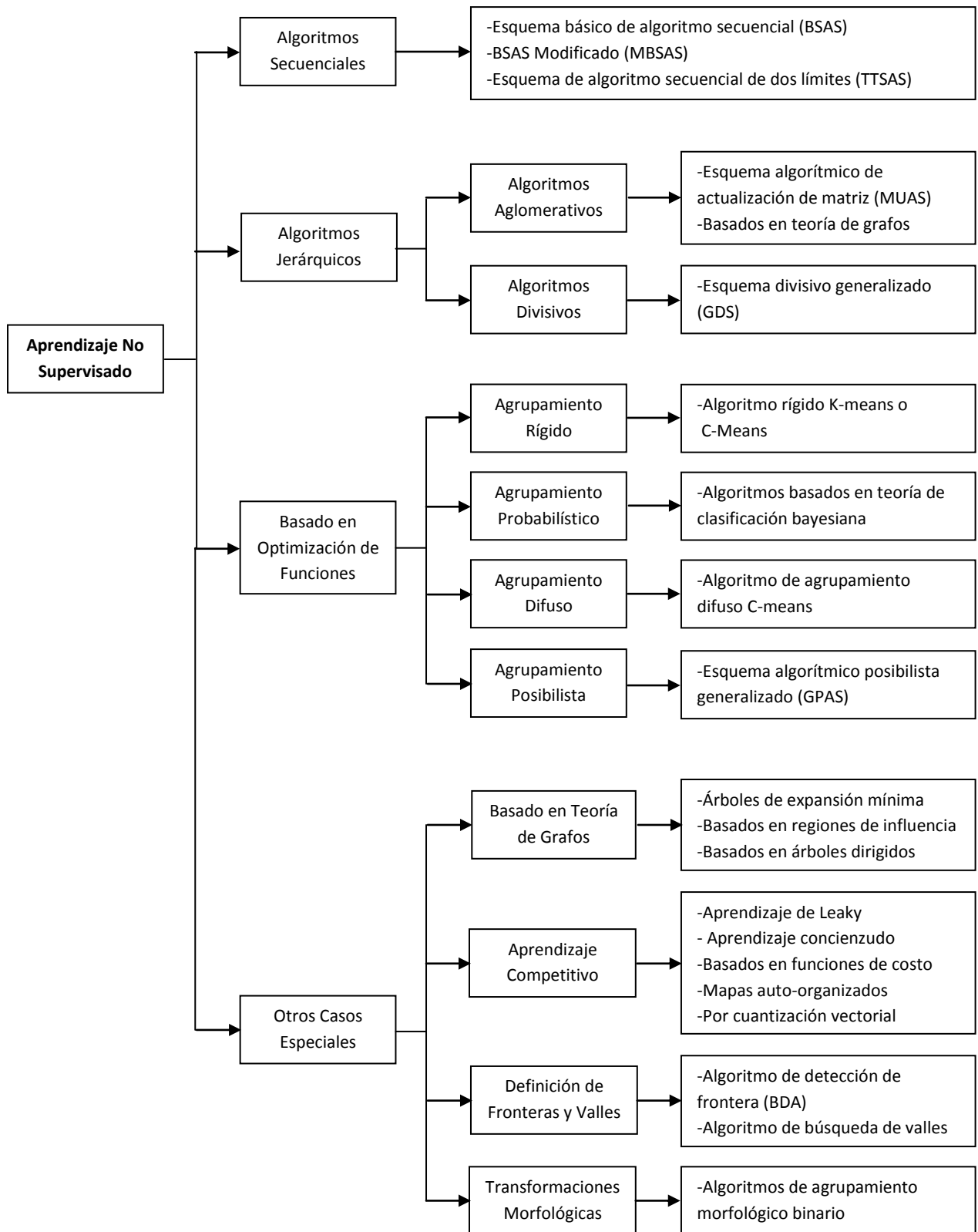


Figura 2.3. Técnicas de reconocimiento de patrones con aprendizaje no supervisado.

Para determinar estados de operación en el proceso se pueden identificar avances relacionados con sistemas expertos en donde se identifican los estados dependiendo de las características de trabajo de variables relevantes del proceso mediante un análisis de tendencia. Con esto se pretende evitar emitir las falsas alarmas producto de las transiciones mediante un reconocimiento del estado de proceso [37], [38]. Este enfoque considera integraciones de características de forma, duración y evolución de variables así como el uso de algoritmos comparativos para las transiciones. Se pretende abordar el tratamiento de las transiciones mediante técnicas de reconocimientos de patrones, realizando una revisión de las usadas para monitoreo de procesos.

2.2.1. Aprendizaje supervisado y no supervisado en monitoreo de procesos

El propósito de la implementación de técnicas de reconocimiento de patrones en monitoreo de procesos se aleja en gran medida de indicar la ocurrencia de una falla y está orientado principalmente al diagnóstico de la misma. El enfoque empleado es usar la relación entre los patrones de datos y las clases de fallas para determinar cuál de éstas ocurrió y determinar sus principales características.

Máquinas de Vectores de Soporte - SVM

Pertenecientes al grupo de aprendizaje supervisado se pueden identificar el empleo de Máquinas de Vectores de Soporte para tareas de diagnóstico en monitoreo de procesos. Las SVM permiten mapear un espacio de características de entrada en un espacio k -dimensional en donde las clases pueden ser separadas satisfactoriamente por un hiperplano [36]. Esta técnica de reconocimiento de patrones supervisado puede ser aplicada como clasificador lineal y no lineal, generalizando su habilidad de clasificación [39].

En el caso lineal para dos clases el objetivo es diseñar un hiperplano basado en una función Kernel lineal que clasifique correctamente todos los vectores de entrenamiento mediante la determinación de la dirección que arroje el máximo margen de separación posible entre las clases y el hiperplano. Eso se logra mediante la minimización de una función objetivo. Si las clases no son separables linealmente se hace uso de una variable de equilibrio que generaliza los casos posibles, esto es, si son separables, si no son separables y son clasificados correctamente, y si no son separables y no se clasifican adecuadamente. De esta forma el hiperplano es diseñado de modo que se maximice el margen de separación entre clases y al mismo tiempo se mantenga la variable de equilibrio lo más cercana al caso de separabilidad. Si se tiene M clases mayor que dos, la

clasificación se aborda considerando M problemas de dos clases y se hace uso de funciones discriminantes para todas las clases. Esto puede conllevar a problemas de clasificación debido a regiones indeterminadas en la optimización. Otra alternativa es utilizar un clasificador por cada par de clases de manera independiente, aumentando el tiempo de entrenamiento por el número de clasificadores a usar [36].

Respecto al caso no lineal, el procedimiento no difiere en gran medida del caso lineal. En este escenario se reemplaza la función Kernel lineal por una no lineal. Dado que la transformación de los datos de entrada se realiza de manera no lineal en un espacio transformado de alta dimensión en donde el hiperplano es diseñado, permite al algoritmo que ajuste el hiperplano con un margen de separación máximo en el espacio de características transformado, comportándose como clasificador no lineal [36].

El proceso químico TE es utilizado también para diagnóstico de fallas, mediante la aplicación de SVM para diagnóstico de 21 fallas en el proceso usando a PCA como técnica para detección [40]. Esta técnica también es utilizada para diagnóstico en turbinas de vapor mediante la clasificación de fallas conocidas [41] así como de fallas mecánicas con señales transformadas en el dominio de la frecuencia como entradas [42]. PCA es aplicada para la reducción de dimensionalidad de las características en el dominio del tiempo y frecuencia de la información de la señal de corriente transitoria en el encendido de un motor por inducción, mientras que SVM es empleada para clasificación de fallas asociadas a la operación del motor [43].

Redes Neuronales Artificiales - ANN

Las Redes Neuronales Artificiales tienen su origen en el estudio de cerebro humano, compuesto por millones de neuronas interconectadas. Por medio de ellas los humanos implementan procesos de reconocimientos de patrones por lo que las ANN son desarrolladas para intentar imitar las estructuras computacionales del cerebro humano y con éstas sus funciones. Su principal característica radica en el mapeo no lineal entre datos de entrada y datos conocidos de salida mediante un arreglo de neuronas interconectadas en capas. Estas capas están conectadas de modo que las señales de entrada a la ANN son propagadas a través de la red. Su comportamiento no lineal se especifica seleccionando la topología de la red, la no linealidad en la neurona y los pesos entre sus conexiones [3].

Dentro de las configuraciones más populares de las ANN se encuentra la red neuronal hacia delante de tres capas, compuesta por una capa de entrada, una capa oculta y una

capa de salida. Cada capa contiene un número determinado de neuronas, llamadas nodos, dependiendo del número de entradas, el tamaño de la red y el número de salidas. Cada nodo de la capa oculta se conecta con todas las entradas y con todas las salidas; no se permite conexiones entre una misma capa y son unidireccionales. Las ANN pueden ser empleadas para diagnóstico de fallas considerando las neuronas de entradas como las variables de proceso y las neuronas de salida como los indicadores de cada una de las fallas posibles a ocurrir. La decisión de la neurona de salida activada depende de los pesos o fuerza de conexión entre dos neuronas, obtenidos durante entrenamiento, y de la función de activación que determina el estado de la salida para un vector de observación [3].

Para detección, redes neuronales dinámicas son usadas para obtener diferentes aproximaciones de modelos correspondientes a operación normal y mediante el monitoreo de residuales se detectan condiciones de operación atípicas [44], siendo también utilizadas como clasificadores lineales tipo Perceptrón simples o de multicapa [45]. Las redes basadas en Funciones de Base Radial también son empleadas para clasificación, considerando etapas de pre-procesamiento y transformación de los datos en algunos casos para mejorar su desempeño tales como aplicación de transformada wavelet [45] y distintos tipos de modelos de filtros [46].

Mapas Auto-Organizados - SOM

Las redes neuronales también pueden ser usadas para aprendizaje no supervisado mediante los Mapas Auto-Organizados en donde la red, con arquitectura de tipo competitiva sin valor de referencia, aprende características internas de los datos de entrada y mapea sus dependencias estadísticas no lineales en relaciones geométricas simples, usualmente en una red de dos dimensiones, manteniendo las correspondencias métricas y topológicas más importantes de los datos originales [3]. Los SOM están compuestos típicamente por una capa de entrada asociada a los datos de entrada y una capa de salida representada por un mapa de características compuesta por un arreglo de neuronas de n dimensiones. La elección típica es 2 dimensiones y topologías de malla rectangular, hexagonal o aleatoria pueden ser usadas para el arreglo de neuronas [47].

La manera en que se relacionan la capa de entrada y el mapa de características es a través de vectores de peso. Los vectores de peso relacionan cada neurona del mapa de características con cada entrada, de modo que en fase de entrenamiento éstos se actualizan para representar en mejor medida los vectores de entrada. Este entrenamiento es iterativo, en cada iteración la distancia Euclidiana es calculada entre el vector de

entrada y los vectores de peso hasta que se encuentre la distancia mínima. La menor distancia determina la neurona que mejor coincide con el dato de entrada, llamada BMU o también neurona ganadora, y los pesos asociados a la neurona BMU y el de sus vecinos son actualizados usando la regla de Kohonen. De esta forma las SOM se entrenan para que por cada vector de entrada se determine la neurona BMU y se actualicen los pesos correspondientes para guardar la información topológica de los datos de entrada [3].

Su uso se ve reflejado en clasificación de condiciones atípicas en procesos de tratamiento de agua residuales para efectos de diagnóstico, demostrando eficiencia computacional, precisión y confiabilidad en los resultados globales y locales [48]. Los SOM también son empleados para análisis exploratorio del comportamiento de las variables en este tipo de procesos, evaluando correlación entre las variables mediante la observación de los planos 2D resultantes [49]. PCA es usada como etapa de pre-procesamiento de información en un horno de fundición para posterior clasificación con SOM [50]. Esta técnica de clasificación también es empleada en sistemas con sensores redundantes [51].

Fuzzy C-Means - FCM

Algoritmos no supervisados dentro del grupo de optimización de funciones han sido aplicados en el monitoreo de procesos. En el método de agrupamiento difuso Fuzzy C-Means un objeto puede ser miembro de diferentes clases al mismo tiempo. En general, usa funciones objetivo las cuales son minimizadas de manera iterativa y que equivalen a ponderaciones de las sumas de distancia entre las clases, además de considerar un exponente que indica qué tan difuso es el agrupamiento [52].

FCM determina grados de pertenencia a cada clase para cada dato de entrada para su agrupamiento. Para ello, se estipula un centroide a cada clase y con base en él se asocian grados de pertenencia de cada dato de entrenamiento a las clases estipuladas. Luego, iterativamente los centroides y los grados de pertenencia son recalculados hasta encontrar la localización acertada del centroide dentro de las clases. Esto se determina mediante la minimización de una función objetivo, representativa de la distancia desde cada dato de entrenamiento hasta un centroide y la cual se pondera de acuerdo al grado de pertenencia del dato correspondiente. En adición, si no se tiene claro el número de clases dentro de un grupo de datos, es posible recurrir a métodos alternativos para determinar los centroides por medio de métodos de agrupamiento sustractivo. Aquí, se determinan los puntos potenciales a ser centroides de clase basados en la densidad de datos cercanos alrededor de estos puntos [53].

Clasificación de fallas conocidas y desconocidas se han efectuado gracias al uso de FCM en donde dependiendo del grado de similitud las fallas son clasificadas dentro de los grupos conocidos o desconocidos [54]. También se validó su uso en la clasificación de datos atípicos para detección de fallas considerando los datos cercanos a la frontera como posibles fallas, abordando tópicos como la precisión en la detección y las falsas alarmas [55]. Implementaciones rígidas de FCM se ve reflejado en el uso de k-means para clasificar características en el dominio de la frecuencia de señales de vibraciones provenientes de rodamientos y de acuerdo con esto se identifican los tipos de falla [56].

3. Diseño de la estrategia híbrida para detección de fallas

La detección temprana de fallas en procesos industriales permite la oportuna intervención y recuperación de la condición normal de operación del proceso. Cuando estos eventos atípicos ocurren en procesos con estados o patrones de operación identificables, el enfoque de detección tradicional los considera como un todo y no discrimina su análisis. La inclusión de información del comportamiento del proceso en la estrategia de detección podría mejorar su sensibilidad ante la ocurrencia de fallas dependientes del estado de operación. Debido a esto y con miras a incrementar la capacidad temprana de detección en procesos con estas características, se presentan estrategias que involucran identificación de los estados de operación basada en teoría para reconocimiento de patrones, así como variantes de la aplicación de técnicas estadísticas multivariadas para detección basadas datos y enfoques de implementación considerando transiciones rígidas y suaves entre los parámetros descriptores de la condición normal en los estado de operación.

3.1. Enfoque tradicional para detección de fallas

Las técnicas de detección de fallas basadas en datos son útiles cuando se consideran procesos complejos e instrumentados en donde no se cuenta con modelos analíticos que describan adecuadamente su comportamiento. Dentro de este tipo de técnicas aplicadas a monitoreo de procesos se destaca PCA al proveer una representación los datos en una dimensión reducida mientras conserva la estructura de correlación entre las variables, además de ser óptima en capturar la variabilidad en los datos. La capacidad de realizar actividades de detección con un conjunto reducido de datos que representan el comportamiento del proceso de dimensionalidad mayor hacen de PCA una de las técnicas de detección basadas en datos más populares en el monitoreo de procesos [2].

En la implementación tradicional de PCA para monitoreo de procesos se pueden distinguir tres fases como se presentan en la Figura 3.1 [3]. Una primera fase en donde el conjunto de datos que describen la condición normal del proceso son procesados y adecuados para la fase de entrenamiento. En la segunda fase, se aplican procedimientos estadísticos y el algoritmo PCA para la reducción de dimensionalidad y cálculo de parámetros descriptores del proceso en una dimensión reducida. Finalmente, para efectos de detección, se calculan estadísticos descriptores de la tendencia sistemática y residual del proceso para

determinar la condición atípica o normal del proceso luego de ser comparados con los estadísticos límite, en la tercera fase.

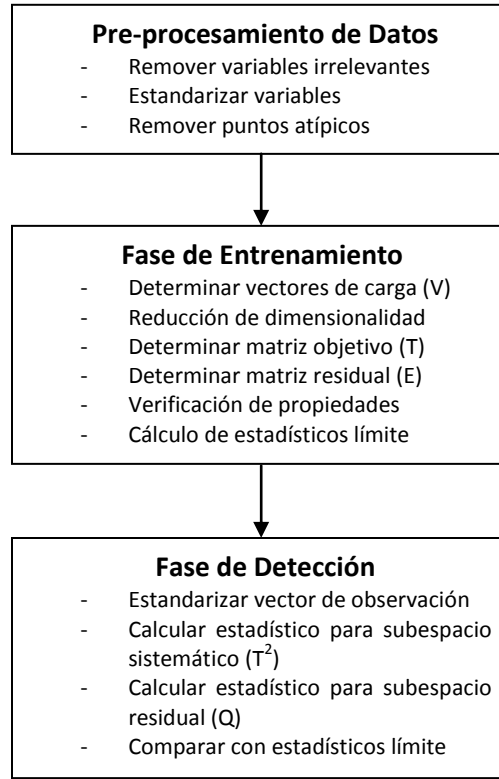


Figura 3.1. Fases de implementación de PCA tradicional.

Mediante la ejecución del procedimiento tradicional condiciones atípicas significativamente diferentes a las descritas por los datos de entrenamiento pueden ser detectadas.

3.1.1. Pre-procesamiento de datos

La importancia de procesar previamente la información a ser utilizada para el empleo de técnicas estadísticas multivariadas basadas en datos radica en que esto mejora significativamente su desempeño al no ser afectados por información irrelevante o errónea que pueda presentarse en el conjunto de entrenamiento. Sea $X \in \mathbb{R}^{n \times m}$ el conjunto de datos de entrenamiento que contiene n observaciones para m variables:

$$\begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1m} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nm} \end{bmatrix} \quad (3.1)$$

n debe ser lo suficientemente grande para que el error relativo ϵ entre un estadístico derivado de un conjunto de muestras como X y un conjunto infinito de datos de entrenamiento sea pequeño, esto es aproximadamente $n = 10 * m$ y se deriva de [3]:

$$\epsilon = \frac{[m(n-1)(n+1)/n(n-m)]F_{\alpha}(m, n-m) - \chi_{\alpha}^2(m)}{\chi_{\alpha}^2(m)} \quad (3.2)$$

Dentro de este conjunto de entrenamiento es posible que existan variables que no aporten información para el monitoreo del proceso. Variables con varianza cero, que se caractericen por presentar grandes errores en la medición, que se encuentren muy lejanas del sistema en estudio, que exhiban frecuentes errores en la comunicación, entre otros, son variables que deben removerse del conjunto de análisis en miras de incrementar la capacidad de detección de la técnica.

Por su parte variables numéricamente dominantes en el sistema monitoreado deben ser tratadas con igualdad frente a aquellas que manejan un rango no muy alto de operación, siendo ambas variables críticas para detección. Para esto, se debe estandarizar las muestras de acuerdo con la media \bar{x} y la desviación estándar s de los datos de entrenamiento. Esto garantiza que se les otorgue igual peso a todas las variables y que la reducción de dimensionalidad se aplique a un conjunto estandarizado de datos con media y desviación estándar como sigue:

$$\begin{aligned} \bar{x} &= [\bar{x}_1 \bar{x}_2 \cdots \bar{x}_m] \\ s &= [s_1 s_2 \cdots s_m] \end{aligned} \quad (3.3)$$

De igual manera, las mediciones aisladas respecto al resto grupo pueden considerarse erróneas. La influencia de estos datos atípicos en la estimación de los parámetros estadísticos puede ser significativa y perjudicar la descripción del comportamiento normal del proceso. Es por ello que previo a la aplicación de las técnicas para detección estos datos atípicos deben ser removidos, ya sea mediante análisis visual o empleando métodos más rigurosos como el uso del estadístico T^2 para remoción de datos atípicos.

3.1.2. Fase de entrenamiento

La implementación de PCA permite dividir el espacio de análisis en dos subespacios, uno que describa la tendencia sistemática y otro que describa la tendencia residual. Para ello, las variables monitoreadas se proyectan en una dimensión reducida en donde no estén correlacionadas mientras conservan la variabilidad del proceso. Monitorear estos

subespacios permite determinar la condición de operación de proceso mediante el uso de estadísticos descriptores de los subespacios.

El algoritmo PCA [3] para la reducción en la dimensionalidad de los datos determina un conjunto de vectores ortogonales V , llamados vectores de carga, ordenados por la cantidad de variabilidad en sus direcciones que pueden obtenerse resolviendo los puntos estacionarios del problema de optimización:

$$\max_{v \neq 0} \frac{v^T X^T X v}{v^T v} \quad (3.4)$$

Donde $v \in \mathbb{R}^m$. Los puntos estacionarios calculados mediante descomposición en valores singulares pueden hallarse de manera alternativa mediante la descomposición en eigenvalores de la matriz de covarianza muestral de X :

$$S = \frac{1}{n-1} X^T X = V \Lambda V^T, \quad S, V, \Lambda \in \mathbb{R}^{m \times m} \quad (3.5)$$

Donde Λ es una matriz diagonal que contiene los eigenvalores o las varianzas (en orden decreciente) de las variables desacopladas en el espacio no correlacionado:

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_m \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_m$$

Por su parte los vectores de carga, V , contienen los eigenvectores en sus columnas equivalentes a los puntos estacionarios del problema de optimización en (3.4):

$$V = [\vec{v}_1 \quad \vec{v}_2 \quad \dots \quad \vec{v}_m] \quad (3.7)$$

La varianza del conjunto de datos de entrenamiento proyectado a lo largo de cada columna de V se refleja en $\lambda_i = \sigma_i^2$. Al retener los primeros a vectores columna de la matriz de eigenvectores V se conforma el conjunto de variables proyectadas usadas para describir la tendencia sistemática del proceso, resultando en la llamada matriz de carga $P \in \mathbb{R}^{m \times a}$. Entre los métodos para determinar a se encuentra la prueba de porcentaje de varianza, la cual calcula el menor número de vectores de carga necesarios para explicar un porcentaje mínimo de la varianza total. Con la definición de a y por ende de la matriz de

carga, se tiene que las proyecciones en un espacio de dimensión reducida de las observaciones en X se encuentran dadas en la matriz objetivo T :

$$T = XP, \quad T \in \mathbb{R}^{n \times a} \quad (3.8)$$

La proyección de las variables transformadas de vuelta al espacio m -dimensional corresponde a:

$$\hat{X} = TP^T \quad (3.9)$$

La matriz residual, E , captura los $m - a$ valores singulares menores y dado que presenta una relación pequeña de señal a ruido, su extracción de X conlleva a una mejor representación de \hat{X} por lo que :

$$E = X - \hat{X}, \quad X, \hat{X}, E \in \mathbb{R}^{n \times m} \quad (3.10)$$

La matriz objetivo T y la matriz residual E describen la tendencia sistemática y la tendencia aleatoria del proceso. La ventaja de obtener estas matrices radica en que sólo a variables equivalentes a los componentes principales t_i , $i = 1, \dots, a$, contenidos en T , necesitan ser monitoreados. Los componentes principales cumplen las siguientes propiedades que pueden verificarse para la evaluación de la aplicación de PCA en determinado conjunto de datos de entrenamiento:

- i. $Var(t_1) \geq Var(t_2) \geq \dots \geq Var(t_a)$
- ii. $Media(t_i) = 0; \forall i$
- iii. $t_i^T t_k = 0; \forall i \neq k$
- iv. No existe otra expansión ortogonal de a componentes principales que capture mayor variabilidad de los datos.

Finalmente, dado un nivel de significancia α los límites estadísticos por debajo del cual el proceso se encuentra en operación normal se determinan para el espacio que describe la tendencia sistemática del proceso y la residual respectivamente como sigue:

$$T_\alpha^2 = \frac{m(n-1)(n+1)}{n(n-m)} F_\alpha(m, n-m) \quad (3.11)$$

$$Q_\alpha = \theta_1 \left[\frac{h_0 c_\alpha \sqrt{2\theta_2}}{\theta_1} + 1 + \frac{\theta_2 h_0 (h_0 - 1)}{\theta_1^2} \right]^{\frac{1}{h_0}} \quad (3.12)$$

Donde $\theta_i = \sum_{j=a+1}^n \sigma_j^{2i}$, $h_0 = 1 - \frac{2\theta_1\theta_3}{3\theta_2^2}$, y c_α es la desviación normal correspondiente al percentil $(1 - \alpha)$.

3.1.3. Fase de detección

En miras de determinar si una nueva observación $x \in \mathbb{R}^{m \times 1}$ es estadísticamente perteneciente al conjunto de datos en condición de operación normal dado por (3.1), se emplean los estadísticos T^2 y Q para cada nuevo vector de observación estandarizado con la información de medias y varianzas determinadas en (3.3). De esta manera estos estadísticos se calculan como sigue:

$$T^2 = x^T P \Sigma_a^{-2} P^T x \quad (3.13)$$

Donde Σ_a contiene los a primeros vectores columna Σ , donde $\Lambda = \Sigma^T \Sigma$. Por su parte, para el espacio residual se tiene que:

$$Q = x^T (I - P P^T) x \quad (3.14)$$

La comparación de entre los estadísticos T^2 y Q con sus respectivos límites dados por (3.11) y (3.12), permite determinar si el proceso se encuentra en condición atípica (si el límite es superado) o en condición normal (si no se supera el límite). Es posible determinar la condición atípica del proceso de esta manera debido a que el estadístico T^2 se relaciona con el cuadrado de la norma-2 (enfoque Euclidean) de un vector de observación escalada respecto a su media. El escalamiento en x se efectúa en la dirección de los eigenvectores y es inversamente proporcional a la desviación estándar a lo largo de los eigenvectores, como se puede observar en (3.13) para el caso del espacio reducido. Por su parte, Q equivale al cuadrado de la norma-2 y mide la desviación de la observación respecto al espacio dimensional reducido de la representación mediante PCA.

3.2. Detección de fallas para procesos con estados de operación

La seguridad en la operación de los procesos industriales es un factor que siempre está presente y al que constantemente se le reúnen esfuerzos para incrementarlo y evitar que se ponga en riesgo al personal operario así como la integridad operacional de los equipos. Los eventos atípicos que ocurren en los procesos industriales no son deseados debido a que son parte ajena a su operación usual y por ende pueden estar asociados a sucesos que afecten la seguridad y el correcto funcionamiento de los componentes del proceso. La

detección temprana de estos eventos ofrece ventajas asociadas a la oportuna intervención humana para actividades de restauración, lo que se traduce en una reducción de costos por operación atípica así como un apoyo a los operadores en las actividades de monitoreo. En este sentido, se abordan los procesos industriales y en especial los que presentan patrones de comportamiento en su operación, en miras de incrementar la capacidad de detección de anomalías cuando éstos son monitoreados.

El enfoque tradicional de aplicación de técnicas de detección de fallas basadas en datos no incorpora información dentro del grupo de datos que describen el comportamiento normal del proceso. Como se planteó en la sección 3.1, se analiza todo el conjunto de datos de entrenamiento para crear las matrices descriptoras de la condición normal en el espacio reducido y en la fase de prueba éstas se aplican junto con los estadísticos límite para determinar si el nuevo vector de observación pertenece o no a este grupo. De esta manera se detectan fallas cuando este vector difiere significativamente del comportamiento estadístico del grupo base de entrenamiento.

Cuando se consideran procesos en donde los estados de operación son normales y hacen parte de X , al aplicar detección de fallas mediante el método tradicional se podría perder sensibilidad debido a que aquí la condición de operación del proceso debe desviarse de la normal o usual descrita por la totalidad de los datos de entrenamiento. Por tanto esto indicaría que si se tienen en cuenta los estados de operación en las actividades de detección, el sistema de monitoreo sería más sensible a fallas dependientes de estos estados ya que la desviación que debe superarse para arrojar resultados de falla es mucho menor a que si se considera la totalidad de los datos. Esto se logra mediante un análisis individual de la condición actual respecto al estado de operación en que se encuentre el proceso.

Al tener en cuenta el enfoque que considera dividir la información que se utiliza para efectos de detección y aplicación de técnicas estadísticas, se percibe la necesidad de incorporar técnicas de reconocimiento de patrones para identificación de los estados de operación. Dentro de estas técnicas de reconocimiento se encuentran las de aprendizaje supervisado y no supervisado. Las técnicas de aprendizaje no supervisado son atractivas en la medida en que los estados de operación no sean fácilmente identificables, ya sea por falta de experiencia de los operadores o por las características y complejidad del proceso. Por otro lado, el éxito de las actividades de control y monitoreo de procesos está ligado a un conocimiento profundo de los mismos y de una adecuada implementación de estrategias para su operación. Debido a esto es posible apoyarse en el conocimiento previo que se tiene del proceso y aplicar técnicas de aprendizaje supervisado como las

máquinas de vectores de soporte, la cual es atractiva al destacarse por su fundamentación matemática y gran capacidad de generalización [39].

En términos de clasificación, las SVM se destacan por desempeñarse como clasificadores lineales o no lineales, basados en una estructura y fundamentación teórica que le otorga ventajas con respecto a otras técnicas dentro del gremio. En comparación con el Análisis Discriminante de Fisher, se tiene que las SVM evitan ser afectadas por puntos atípicos dentro del conjunto de datos al tener como objetivo maximizar el margen de separación entre las clases y no fundamentarse en la dispersión dentro de las clases y entre las clases [57]. Por otro lado, no presentan riesgos de hallar mínimos locales dado que las SVM buscan minimizar el error de clasificación y no el error empírico como en las Redes Neuronales Artificiales. Asimismo al minimizar el riesgo estructural, en comparación a la minimización de riesgo empírico de las Redes Neuronales, se reduce significativamente la cantidad de datos que se necesitan para su entrenamiento [57]. En adición, a pesar que su desarrollo data de los 1990s, ya se encuentra considerada como una de las diez mejores técnicas en lo que a clasificación y procesamiento de datos se refiere [58].

La integración de la SVM con el algoritmo PCA, y en general la consideración de los estados de operación en la decisión de monitoreo, implica una nueva estructura de la estrategia de detección de fallas. Se debe partir de la identificación de los estados involucrados en el proceso a partir de las variables que los describen satisfactoriamente, dado que pueden ser todas o algunas de las pertenecientes al proceso monitoreado. Luego dos rutas de entrenamiento a seguir, una orientada al entrenamiento de la técnica de clasificación, en este caso las SVM, encargada de establecer el estado de operación actual en que se encuentre el proceso y otra ruta relacionada con la aplicación de la técnica multivariada para detección de fallas, en este caso PCA, encargada de establecer la condición atípica o normal del proceso dado que éste se encuentre en determinado estado de operación.

En lo que respecta a la decisión en zonas de transición, éstas deben tener un tratamiento especial debido a que no pertenecen en su totalidad a ninguno de los estados operacionales establecidos. Uno de los enfoques es considerar transiciones rígidas, esto es, aplicar los estadísticos producto de la transformación del vector de observación de acuerdo con las matrices derivadas de la representación de PCA en el estado especificado por la SVM. Otro enfoque se orienta a considerar transiciones suaves entre estados, mediante la extracción de propiedades de las variables cuando el proceso describe un comportamiento transitorio. Aquí, uno de los retos para la técnica de reconocimiento de patrones radica en establecer en qué momento el proceso se encuentra en estado

transitorio y de qué manera se utilizaría en términos de detección. La Figura 3.2 resume la estructura general a abordar cuando procesos con estados de operación son monitoreados para detección de fallas.

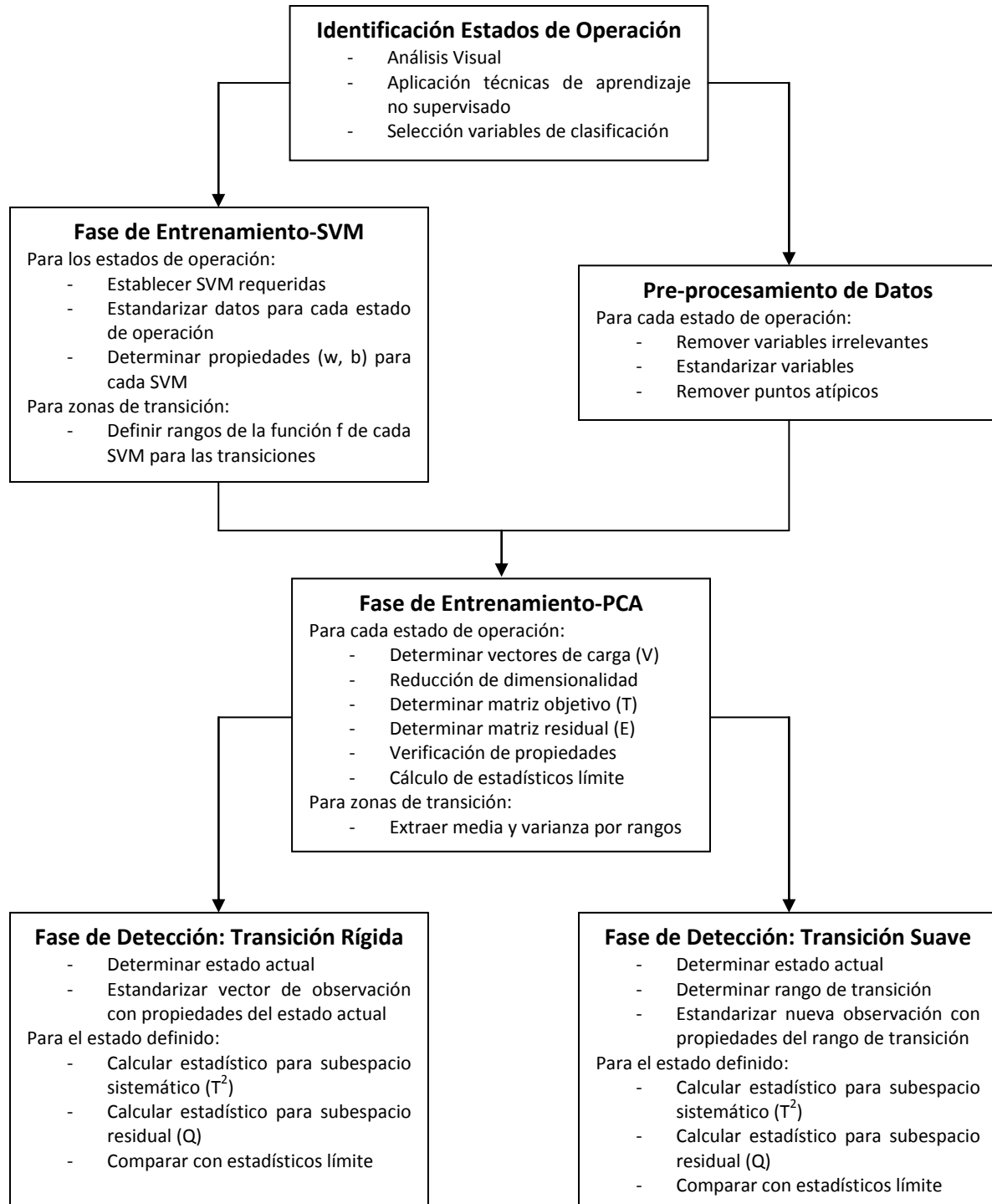


Figura 3.2. Visión general de estrategia para detección de fallas en procesos con estados de operación.

El uso conjunto de SVM con PCA pretende incrementar la capacidad de detección mediante la reducción del tiempo de notificación de la ocurrencia de una falla, empleando la técnica de clasificación para detección del estado de operación y a la técnica estadística de reducción de dimensionalidad para detección de condiciones atípicas en la operación del proceso.

3.2.1. Identificación de estados de operación

Las estrategias propuestas para detección de fallas plasmadas en la Figura 3.2 están basadas en que el proceso en estudio presenta estados de operación identificables. Esto permite abordar el enfoque de análisis de variabilidad independiente para cada estado en contraste con el enfoque tradicional que sustenta su análisis de variabilidad para todo el conjunto de datos.

Un proceso con estados de operación implica la presencia de patrones en su comportamiento normal. Esto se ve reflejado por ejemplo en sistemas de transporte y distribución de energía en donde se aprecian diferentes perfiles de consumo, evidenciándose principalmente en variables como la presión y flujo de operación. Por otro lado, en los procesos de producción de manera general se pueden identificar etapas con un comportamiento repetitivo que permiten dividir el campo de análisis y mejorar la capacidad de detección de fallas. En definitiva, aquellos procesos en donde su condición normal implique más de un punto de operación asociado a un patrón de trabajo pueden considerarse como casos objetivo para implementar las estrategias propuestas.

Contemplar estados de operación para detección de fallas implica, como primera medida, identificar estos estados dentro de la operación del proceso así como la selección de las variables base que permitirán en modo detección definir el estado actual en que el proceso se encuentra. En todo sistema de control y monitoreo la clave es el conocimiento previo que se tiene del proceso para garantizar mayor efectividad en las implementaciones. Por tanto, una inspección gráfica de las variables significativas en la operación puede arrojar resultados satisfactorios para la identificación de los estados. Asimismo, también es posible considerar alternativas de soporte como la aplicación de técnicas de reconocimiento de patrones no supervisado para determinar el número de estados de operación.

En la definición de los estados de operación es importante la selección de las variables que servirán para detectar el estado actual del proceso en modo detección. Posterior a la identificación de los estados es posible que se distingan las variables clave para realizar esta tarea y se proceda inmediatamente con la fase entrenamiento. Sin embargo, puede ocurrir que esto no sea tan evidente o se cuenten con muchas variables que definan patrones. Para ello se pueden considerar alternativas como analizar el grado de incidencia entre las variables mediante análisis de correlación entre ellas, permitiendo además eliminar redundancia de información y reducir el número de variables clave. Con el grupo reducido de variables, se pueden considerar factores como la confiabilidad en la medición y los problemas de comunicación con el sistema de adquisición de datos para discriminar variables y seleccionar las apropiadas.

3.2.2. Fase de entrenamiento - SVM

La SVM es un clasificador binario no probabilístico basado en un hiperplano diseñado de modo tal que clasifique correctamente los vectores de entrenamiento mediante la determinación de la dirección que arroje el máximo margen de separación posible entre las clases y el hiperplano. Al ser un clasificador binario implica que sólo se puede diseñar una SVM para decidir la pertenencia de un vector de observación a dos clases únicamente. Esto conlleva a que si se tiene más de dos estados de operación se debe programar una estrategia de decisión basada en tantas SVM requeridas como estados se tengan. Esta limitante de las SVM se compensa con su capacidad de generalización ante datos futuros y desempeño sobresaliente frente a otras técnicas de clasificación con aprendizaje supervisado.

Las SVM pertenecen al grupo de técnicas de reconocimiento de patrones con aprendizaje supervisado debido a que incorporan dentro de su entrenamiento información acerca de la pertenencia de los datos a una de las dos clases especificadas. Entrenar una SVM es determinar los parámetros del hiperplano de decisión con base en los vectores de soporte ubicados en los hiperplanos marginales e identificados en el conjunto normalizado de datos de entrenamiento mediante técnicas de optimización. Por tanto, los vectores de soporte constituyen la fundamentación para la separación óptima de las clases como se muestra en la Figura 3.3, en el caso de dos variables de caracterización.

La Figura 3.3(a) presenta la ubicación gráfica de un conjunto de datos en los cuales se pueden identificar dos clases. Se observa que cualquier hiperplano dado en esta figura proporciona un error experimental de cero. Sin embargo, aquel hiperplano que otorga la

máxima separación entre las clases es el especificado por la Figura 3.3(b) producto de la implementación de una SVM.

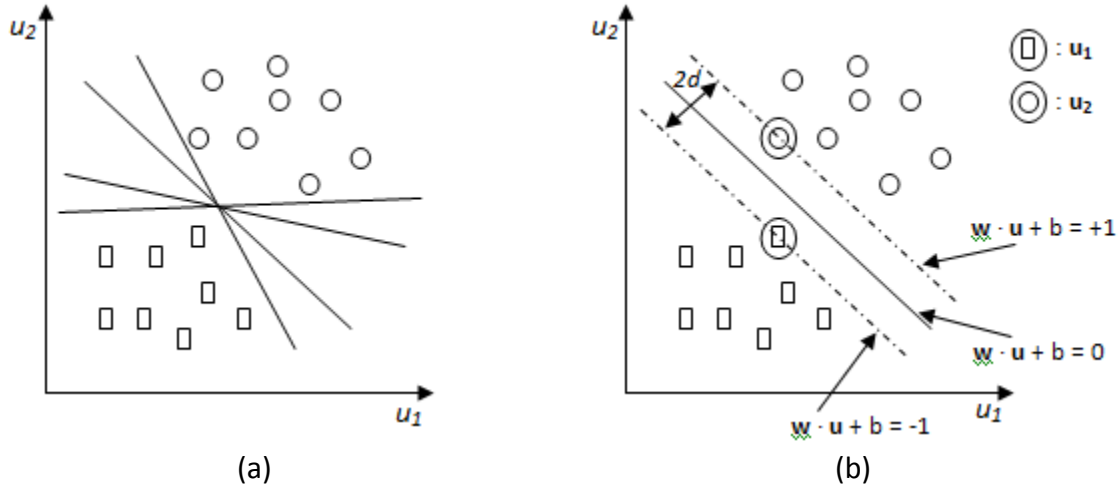


Figura 3.3. Entrenamiento SVM. (a) Posibles hiperplanos de decisión. (b) Hiperplano de decisión formado por SVM (línea sólida) e hiperplanos marginales (líneas punteadas); u_1 y u_2 los vectores de soporte; $2d$, el ancho de separación (adaptado de [57]).

La definición de los vectores de soporte es el resultado del proceso de maximizar el margen de separación d entre las clases. Para ello se consideran datos de entrenamiento estandarizados asociados a la clase $+1$ ó -1 a la que pertenecen como sigue:

$$\{u_i, y_i: i = 1, \dots, N\} \in U \times \{+1, -1\} \quad (3.15)$$

El objetivo del entrenamiento con los datos de entrenamiento es formar un hiperplano de decisión de modo que:

$$u \cdot w + b = 0 \quad (3.16)$$

De manera general para todos los datos de entrenamiento y considerando los hiperplanos marginales se puede expandir la expresión mostrada en (3.16) así:

$$\begin{aligned} u_i \cdot w + b &\geq +1, y_i = +1, i = 1, \dots, N \\ u_i \cdot w + b &\leq -1, y_i = -1, i = 1, \dots, N \end{aligned} \quad (3.17)$$

Dado que en los hiperplanos marginales se ubican los vectores de soporte, se presenta el caso particular de la Figura 3.3(b) donde u_1 y u_2 satisfacen:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{w} + b &= +1 \\ \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{w} + b &= -1 \end{aligned} \quad (3.18)$$

De esta forma, el ancho de separación $2d$ mostrado en la Figura 3.3(b) se puede determinar de (3.18) como sigue:

$$\begin{aligned} \mathbf{w} \cdot (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2) &= 2 \\ \frac{\mathbf{w}}{\|\mathbf{w}\|} \cdot (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2) &= \frac{2}{\|\mathbf{w}\|} \\ 2d &= 2/\|\mathbf{w}\| \end{aligned} \quad (3.19)$$

Combinando las restricciones presentadas en (3.17) para los datos de entrenamiento, se forma una única restricción dada por:

$$y_i(\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{w} + b) \geq 1, \forall i = 1, \dots, N \quad (3.20)$$

Se pretende maximizar el margen de separación d . Para ello, a partir de (3.20) se presenta la siguiente formulación de Lagrange para minimizar $\|\mathbf{w}\|$ y obtener los resultados deseados:

$$L(\mathbf{w}, b, \beta) = \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 - \sum_{i=1}^N \beta_i (y_i(\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{w} + b) - 1) \quad (3.21)$$

Aquí, $L(\mathbf{w}, b, \beta)$ se minimiza de manera simultánea con respecto a \mathbf{w} y b , mientras se maximiza con respecto a β_i , de modo que:

$$\frac{\partial}{\partial b} L(\mathbf{w}, b, \beta) = 0 \wedge \frac{\partial}{\partial \mathbf{w}} L(\mathbf{w}, b, \beta) = 0 \wedge \beta_i \geq 0 \quad (3.22)$$

Considerando (3.21) y (3.22) se obtiene como resultado:

$$\sum_{i=1}^N \beta_i y_i = 0 \wedge \mathbf{w} = \sum_{i=1}^N \beta_i y_i \mathbf{u}_i \quad (3.23)$$

Sustituyendo (3.23) en (3.21) produce:

$$L(\mathbf{w}, b, \beta) = \sum_{i=1}^N \beta_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \beta_i \beta_j y_i y_j (\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_j) \quad (3.24)$$

De aquí, se obtiene la formulación de optimización dual de Wolfe:

$$\max_{\beta} \sum_{i=1}^N \beta_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \beta_i \beta_j y_i y_j (\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_j) \quad (3.25)$$

Sujeto a las siguientes restricciones de la formulación de Lagrange:

$$\sum_{i=1}^N \beta_i y_i = 0 \wedge \beta_i \geq 0 \quad (3.26)$$

De la optimización en (3.25) se obtienen los valores de $\beta_i \geq 0, i = 1, \dots, N$ a emplear para el cálculo de uno de los parámetros de la hiperplano de decisión mostrado en (3.16). Estos valores de β_i son usados junto con los datos de entrenamiento en (3.15) para la definición de \mathbf{w} resultante en (3.23).

El segundo parámetro del hiperplano de decisión, b , se deriva del uso de los vectores de soporte. Del grupo de β_i obtenidos en la formulación de optimización, aquellos $\beta_i = 0$ corresponden a muestras irrelevantes lejos de la zona de separación y aquellos $\beta_i > 0$ equivalen a datos críticos para la separación. Para este último conjunto de datos, se tiene que para que sean considerados vectores de soporte se debe satisfacer la condición Karush-Kuhn-Tucker para determinar los puntos de silla:

$$\beta_i \{y_i (\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{w} + b) - 1\} = 0, i = 1, \dots, N \quad (3.27)$$

Debido a que $\beta_i \geq 0$ los vectores de soporte que determinan los hiperplanos marginales y de decisión son aquellos que satisfacen:

$$y_k (\mathbf{u}_k \cdot \mathbf{w} + b) - 1 = 0, \forall k \in J \quad (3.28)$$

Donde J representa el conjunto de índices de los vectores de soporte. De esta manera y teniendo el cálculo previo de \mathbf{w} se procede a determinar b de (3.28) como sigue:

$$b = 1 - \mathbf{u}_k \cdot \mathbf{w}, y_k = 1 \wedge \mathbf{u}_k \in J \quad (3.29)$$

De forma general se establece la frontera de decisión de la siguiente forma:

$$f(\mathbf{u}) = \mathbf{u} \cdot \mathbf{w} + b = \sum_{i=1}^k y_i \beta_i (\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}_i) + b \quad (3.30)$$

La frontera de decisión especificada en (3.30) equivale al caso de separabilidad lineal en donde la función Kernel es de tipo lineal. Extensiones de la fundamentación matemática presentada se pueden abordar para casos en donde los datos no son linealmente separables [57]. Aquí, funciones Kernel de tipo no lineal son usadas para realizar transformaciones no lineales de los datos en un espacio k-dimensional en donde éstos son linealmente separables. En general para una función Kernel no lineal se reescribe la función de frontera de decisión como sigue:

$$f(\mathbf{u}) = \sum_{i=1}^k y_i \beta_i K(\mathbf{u}, \mathbf{u}_i) + b \quad (3.31)$$

Por otro lado, separaciones difusas pueden ser consideradas al incluir un parámetro de penalización $C > 0$ y variables de holgura $\xi \geq 0$ en la formulación de minimización de Lagrange y en la formulación de optimización dual. La concepción de separación difusa se concibe como una separación relajada y menos estricta que permite abordar la solución vacía que se presenta cuando los datos no son linealmente separables. Este margen es dependiente del valor de penalización, esto es, a mayor valor de C menos amplio es el margen de separación y a menor valor de C se permite un relajamiento mayor en la separación. Como consecuencia de ello, se tiene que el número de los vectores de soporte tiene una dependencia inversa al valor de C . La nueva función a minimizar se vuelve:

$$\frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 + C \sum_i \xi_i \quad (3.32)$$

Sujeta a la restricción:

$$y_i(\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{w} + b) \geq 1 - \xi_i \quad (3.33)$$

De manera estricta cuando una observación pertenece a una clase, la función $f(\mathbf{u})$ en (3.30) arroja valores correspondientes a $|f(\mathbf{u})| \geq 1$. Debido a esto para abordar las zonas de transición se plantea un enfoque en donde se discretiza la función cuando $|f(\mathbf{u})| < 1$. Así, monitoreando el resultado de $f(\mathbf{u})$ se puede establecer el estado actual de operación respecto a una SVM en particular ó cuándo éste se encuentra en zona de transición. La definición de los rangos depende del análisis en la transición de las SVM involucradas, esto es, si responde a una señal monotonica, con tasa de cambio alta o baja, etc.; en general se busca que la zona de transición se describa adecuadamente. Asimismo, es posible que los límite inferior y superior de los rangos transición no siempre sean estrictamente superiores a -1 e inferiores a $+1$ respectivamente. Esto debido a que es posible que en un estado especificado, el ruido natural conlleve a que observaciones instantáneas se clasifiquen como transición de manera incorrecta. Para ello una de las alternativas

propuestas es considerar los límites inferior y superior de $f(\mathbf{u})$ para un estado (+1 por ejemplo) como los equivalentes al doble de la varianza de ese estado respecto a su media, reuniendo cerca del 95% de los datos. Así, el límite inferior de $f(\mathbf{u})$ para el estado +1 es también el límite superior del rango de transición. Para el estado -1 se resuelve de manera análoga.

3.2.3. Pre-procesamiento de datos

El enfoque utilizado para abordar detección de fallas en procesos con estados de operación implica el análisis individual del comportamiento del proceso en el espacio reducido dependiendo del estado en que éste se encuentre. Para ello, es necesario recolectar conjuntos de datos descriptores de cada estado de operación para la posterior aplicación del algoritmo PCA a cada uno de ellos. Esto implica que cada conjunto de datos debe ser procesado previamente en miras extraer efectivamente información relevante para realizar las actividades de monitoreo. Este procesamiento incluye la recolección de un número suficiente de muestras de modo que los estadísticos límite calculados presenten menores errores relativos respecto al real calculado con un número infinito de muestras. De igual manera, es necesaria la remoción de variables irrelevantes en el análisis dado que presentan errores que no las hacen aptas para su consideración. Asimismo, el escalamiento y la remoción de valores atípicos pueden mejorar significativamente el desempeño del monitoreo al evitar que variables dominantes y valores aislados influyan negativamente en la concepción de comportamiento normal al momento de realizar la reducción de dimensionalidad de los datos de entrenamiento. Estos procedimientos, introducidos previamente en la sección 3.1.1, deben ser aplicados al conjunto de datos recolectados para cada estado de operación que se determinaron en la fase de identificación, sección 3.2.1.

3.2.4. Fase entrenamiento – PCA

La reducción de dimensionalidad que se realiza con la aplicación del algoritmo PCA se ejecuta en la fase de entrenamiento a los datos asociados a cada estado de operación. Esto permite determinar la matriz objetivo T descriptora del comportamiento sistemático del proceso en el espacio reducido, así como determinar matriz residual E descriptora de tendencia aleatoria del proceso. Para ello, se debió calcular los vectores de carga V producto de la descomposición en eigenvalores de la matriz de covarianza de cada conjunto de datos de entrenamiento para los estados de operación. Estos vectores de carga están asociados a la matriz de carga P mediante la selección de las α primeras columnas que describan la mayor variabilidad (tendencia sistemática) en el espacio

transformado. En este nuevo enfoque dado que el algoritmo PCA es aplicado tantas veces como estados de operación se tengan, también se tienen tantos límites de detección T^2 y Q como estados haya. En general, los lineamientos presentados en la fase de entrenamiento de PCA para el enfoque tradicional, sección 3.1.2, se aplican de manera repetida para cada conjunto de datos descriptores de los estados de operación identificados.

Debido a que los estadísticos usados para describir la condición de operación del proceso, si es atípica o es normal, están fundamentados en formulaciones matemáticas que describen distancias multivariadas respecto a una zona de operación normal la información de media y varianza de los datos de entrenamiento son usados para el escalamiento de las observaciones de entrenamiento y de prueba. Teniendo esto en consideración, cuando el proceso opera en alguno de los estados especificados la desviación de los estadísticos debería ser pequeña si no hay fallas presentes. Sin embargo cuando el proceso opera en zonas de transición al momento de calcular los estadísticos usando la información de media y varianza del estado próximo, por ejemplo, para el escalamiento de las observaciones se tiene que como éstas no corresponden al punto actual especificado por la estrategia de clasificación se esperan grandes diferencias entre los estadísticos calculados y los límite. Es por ello que en la fase de entrenamiento se registra información de media y varianza para los rangos de transición determinados en la sección 3.2.2. Esto para evitar grandes desviaciones entre los estadísticos para monitoreo y que éstas se confundan con fallas en el proceso cuando en realidad son debida a transiciones entre los estados.

3.2.5. Fase de detección: transición rígida

El enfoque tradicional de la fase de detección de fallas consiste en la comparación de los estadísticos T^2 y Q dados por (3.13) y (3.14) respectivamente con los estadísticos límite correspondientes dados por (3.11) y (3.12). Superar numéricamente los estadísticos límite implica una condición de operación diferente a la descrita por los datos de entrenamiento. Al considerar el enfoque propuesto para procesos con estados de operación requiere realizar esta comparación pero teniendo en cuenta el estado actual. Esto es, mediante la integración de SVM como técnica de clasificación para detección del estado actual y PCA como técnica de detección de condiciones atípicas se construye una estrategia de decisión que no considera zonas de transición.

En primera medida, para un nuevo vector de observación se analizan aquellas variables seleccionadas para la identificación de estados de modo que junto con la estrategia de

decisión se establezca el estado actual de operación del proceso. Esta estrategia de decisión considera las SVM entrenadas para el número de estados especificados y cada SVM arroja una decisión de clase. La integración de las decisiones individuales de las SVM da como resultado el estado actual. Posterior a esto, el nuevo vector de observación es estandarizado con la información de media y desviación estándar del conjunto de datos de entrenamiento del estado actual. Luego, los estadísticos T^2 y Q dados por (3.13) y (3.14) son calculados y comparados con sus respectivos límites. Si el nuevo vector de observación pertenece a un punto de transición, el enfoque propuesto no presenta modificaciones.

3.2.6. Fase de detección: transición suave

La fase de detección considerando transiciones rígidas entre los estados de operación cuenta con inconvenientes cuando el punto de operación no pertenece a ninguno de los estados especificados. En este caso, se espera que la desviación de los estadísticos T^2 y Q para las nuevas observaciones difiera significativamente de la condición normal y por ende arroje como resultado condiciones de falla en la operación del proceso, siendo las transiciones las causantes de esta desviación.

La estrategia de detección cuando el proceso se encuentra en alguno de los estados especificados no difiere del enfoque presentado en la sección 3.2.5. Esto indica que dado que la estrategia de decisión de las SVM entrenadas entregue como resultado un estado actual de operación, el vector de observación es estandarizado con la información de media y desviación estándar del conjunto de datos de entrenamiento asociado al estado actual. La matriz de carga P del correspondiente estado de operación es usada para el cálculo de los estadísticos con (3.13) y (3.14) para posterior comparación con los estadísticos límite (3.11) y (3.12) respectivamente.

Cuando el proceso se encuentra en zonas de transición, la diferencia respecto al enfoque rígido radica en que en la estrategia de decisión del estado actual no sólo se define el estado actual de forma rígida sino que también la función $f(\mathbf{u})$ de cada SVM es evaluada para determinar puntos de transición. Si este es el caso, el vector de observación no es estandarizado con la información de media y desviación estándar como se planteó anteriormente sino que se utilizan aquellas derivadas del conjunto de entrenamiento especificado por el rango de transición en que se encuentre $f(\mathbf{u})$. A pesar que el proceso se encuentre en zonas de transición, la proyección del vector de observación en el espacio reducido se realiza con la matriz de carga P del estado actual especificado por la estrategia de decisión. Esto se sustenta en que sólo los conjuntos de datos de

entrenamiento correspondientes a los estados de operación son considerados como comportamiento normal del proceso y que las transiciones son inevitables pero a la vez coyunturales en la operación del proceso.

Tabla 4.1. Variables monitoreadas en el caso de estudio.

Flujo de carga -Línea 1	$f_1(t)$	ft^3/min	Flujo - Línea 4	$f_4(t)$	ft^3/min
Flujo de drenaje	$f_o(t)$	ft^3/min	Temperatura - Línea 4	$T_4(t)$	$^{\circ}F$
Temperatura - Línea 1	$T_1(t)$	$^{\circ}F$	Flujo - Línea 6	$f_6(t)$	ft^3/min
Flujo de vapor	$w(t)$	ft^3/min	Temperatura - Línea 6	$T_6(t)$	$^{\circ}F$
Concentración de A - Línea1	$C_{A1}(t)$	$\frac{lbmoleA}{ft^3}$	Concentración de A - Línea 6	$C_{A6}(t)$	$\frac{lbmoleA}{ft^3}$
Concentración de A - Línea 4	$C_{A4}(t)$	$\frac{lbmoleA}{ft^3}$	Concentración de B - Línea 6	$C_{B6}(t)$	$\frac{lbmoleB}{ft^3}$
Concentración de B - Línea 4	$C_{B4}(t)$	$\frac{lbmoleB}{ft^3}$	Concentración de C - Línea 6	$C_{C6}(t)$	$\frac{lbmoleC}{ft^3}$
Concentración de C - Línea 4	$C_{C4}(t)$	$\frac{lbmoleC}{ft^3}$			

Para recrear la variabilidad natural en el proceso una estructura de ruido sobre las variables de entrada $f_1(t)$, $f_o(t)$, $T_1(t)$, $w(t)$ y $C_{A1}(t)$ es superpuesta. Para ello el modelo auto-regresivo de media móvil de primer orden [60], ARMA(1,1), es usado para recrear la variabilidad natural del proceso [61]:

$$Z_t = c + \varphi * Z_{t-1} + A_t - \theta * A_{t-1} \quad (4.1)$$

Donde Z_t es la salida del modelo en el tiempo t , A_t corresponde al ruido blanco en el tiempo t , c es la media de la serie de tiempo, φ y θ son los parámetros del modelo. Aquí se integra el valor anterior de la serie de tiempo a modelar junto con el valor anterior y actual del ruido blanco para predecir la variabilidad natural en un instante de tiempo t de cada variable de entrada. La media del modelo, c , se hace cero para que sea sustituida por el valor actual de cada variable de entrada.

Los estados de operación en el proceso en estudio son inducidos en el flujo de entrada en la línea 1, $f_1(t)$. Se consideran flujos de trabajo de 50, 80 y $110ft^3/min$. Para estas condiciones las variables monitoreadas responden como se muestra en la Figura 4.2.

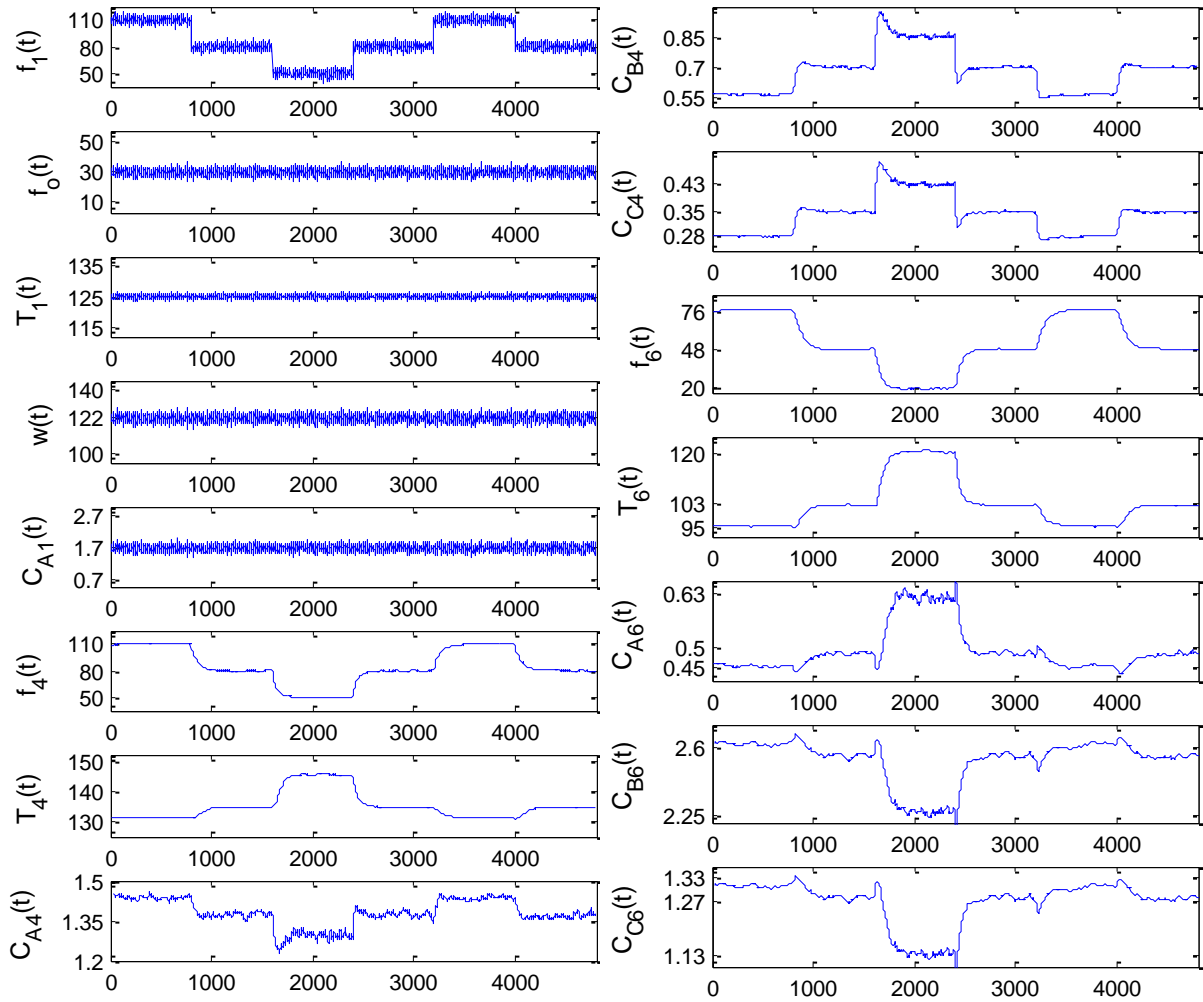


Figura 4.2. Variables monitoreadas con estados de operación.

Los valores típicos de operación, constantes y ecuaciones del modelo de proceso con que se derivó el comportamiento observado en la Figura 4.2 se incluyen en el Anexo. Estas ecuaciones se emplearán para validar la estrategia híbrida de detección de fallas y su desempeño frente al enfoque tradicional.

4.2. Enfoque tradicional: fase de entrenamiento

Para calcular las matrices representativas de la condición normal de operación en el espacio reducido inicialmente se toma como conjunto de datos muestras correspondientes a un mes de operación. En este conjunto de datos, cada estado de operación ocurre 10 veces y tiene un tiempo de duración de 1 día, lo que conlleva a 43200

muestras representativas de la condición normal, $X \in \mathbb{R}^{43200 \times 15}$. Con este número de observaciones, donde $n = 43200$ y $m = 15$, para un nivel de significancia $\alpha = 0.01$ se tiene un error relativo de acuerdo con (3.2) de:

$$\epsilon = 5.5095 \times 10^{-4} = 0.0551\% \quad (4.2)$$

Este resultado indica que el conjunto X seleccionado se asemeja a un conjunto infinito de datos con un error pequeño. Luego, para cada columna o variable monitoreada en X se extrae la información de media y desviación estándar de acuerdo con (3.3). Estos valores servirán para la estandarización de las muestras, tanto en la fase de entrenamiento como en la fase de detección. No se presenta el caso en que variables aisladas, con varianza cero ó puntos atípicos tengan que ser removidos.

Con el conjunto X estandarizado se realiza el procedimiento de descomposición en eigenvalores y eigenvectores de la matriz de covarianza S de acuerdo con (3.5). De aquí se obtienen $V \in \mathbb{R}^{15 \times 15}$ y $\Lambda \in \mathbb{R}^{15 \times 15}$ que representan las direcciones de todas las variables desacopladas en el espacio transformado y el escalamiento a varianza unitaria en esas direcciones, respectivamente.

Al determinar los a primeros vectores columna en los vectores de carga V no se utilizan para monitoreo todas las variables en el espacio transformado sino sólo aquellas que describan el comportamiento sistemático del proceso. Para ello se utiliza la matriz diagonal de eigenvalores Λ y se retienen las columnas que expliquen por lo menos 95% de la variabilidad contenida en esta matriz dada por (3.6). En el caso de las matrices derivadas de X se tiene que para $a = 3$ este umbral es superado por lo que las tres primeras columnas de la matriz V conforman la matriz de carga $P \in \mathbb{R}^{15 \times 3}$.

La definición de la matriz de carga P permite determinar la proyección de las variables en el espacio reducido que contiene la tendencia sistemática y residual representados respectivamente en la matriz objetivo $T \in \mathbb{R}^{43200 \times 3}$ y la matriz residual $E \in \mathbb{R}^{43200 \times 15}$, de acuerdo con (3.8) y (3.10). De aquí, las propiedades que deben cumplir los componentes principales o vectores columna de la matriz objetivo se pueden corroborar como se muestra en la Tabla 4.2. De acuerdo con (3.11) y (3.12) los umbrales para los estadísticos en el enfoque tradicional son:

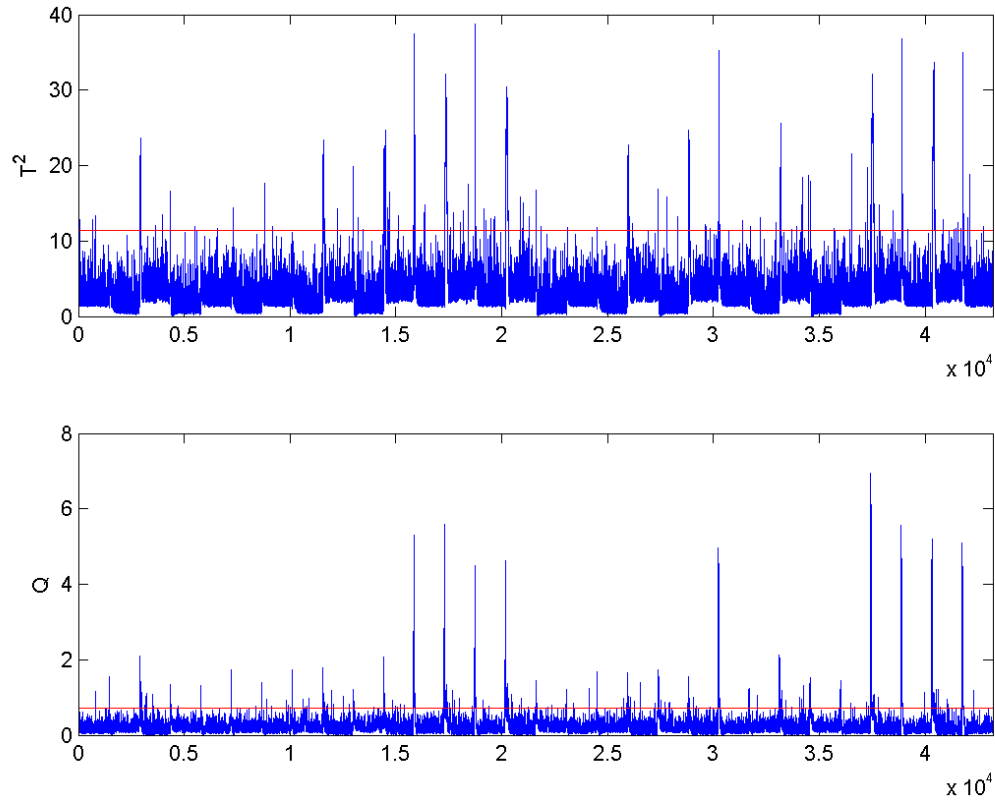
$$T_{0.01}^2 = 11.3470 \quad (4.3)$$

$$Q_{0.01} = 1.1505 \quad (4.4)$$

Tabla 4.2. Verificación de propiedades componentes principales en enfoque tradicional.

$Var(\mathbf{t}_1) \geq Var(\mathbf{t}_2) \geq Var(\mathbf{t}_3)$	$Var(\mathbf{t}_1)$	$Var(\mathbf{t}_2)$	$Var(\mathbf{t}_3)$
	9.956	3.941	0.782
$Media(\mathbf{t}_i) = 0; \forall i$	$Media(\mathbf{t}_1)$	$Media(\mathbf{t}_2)$	$Media(\mathbf{t}_3)$
	-2.53×10^{-14}	1.27×10^{-12}	1.74×10^{-13}
$\mathbf{t}_i^T \mathbf{t}_k = 0; \forall i \neq k$	\mathbf{t}_1	\mathbf{t}_2	\mathbf{t}_3
\mathbf{t}_1^T	4.331×10^5	3.797×10^{-11}	-2.114×10^{-11}
\mathbf{t}_2^T	3.797×10^{-11}	1.714×10^5	-2.273×10^{-11}
\mathbf{t}_3^T	-2.114×10^{-11}	-2.273×10^{-11}	3.402×10^4

A partir de la matriz de carga P es posible emplear los estadístico T^2 y Q con (3.13) y (3.14) para las observaciones en condición normal de operación y compararlas con los umbrales respectivos, (4.3) y (4.4). Esto se muestra en la Figura 4.3.

**Figura 4.3.** T^2 y Q para datos de entrenamiento X en enfoque de detección tradicional.

En la Figura 4.3 se refleja el efecto de la probabilidad de ocurrencia del error tipo I dado por el nivel de significancia escogido en donde la hipótesis nula, observaciones pertenecientes a la condición normal, es rechazada siendo ésta verdadera.

4.3. Enfoque híbrido: fase de entrenamiento

Los pasos metodológicos presentados en la Figura 3.2 y correspondientes a las actividades previas a la fase de decisión son aplicados al caso de estudio, el cual incorpora estados de operación en su condición normal.

4.3.1. Identificación de estados de operación

La implementación del enfoque de detección híbrido considera la aplicación de teoría de reconocimiento de patrones para la identificación del estado de operación en el cual analizar la condición de falla. Para ello, es necesario previamente determinar estos estados en la operación del proceso así como la selección de las variables críticas que los determinan.

En primera instancia, un análisis visual se realiza al comportamiento de los datos de proceso. Tomando como referencia la Figura 4.2 se puede observar que un porcentaje considerable de las variables responden ante los cambios descritos de manera evidente por $f_1(t)$. Las variables de flujo $f_4(t)$ y $f_6(t)$ reflejan una dependencia directa con $f_1(t)$ en su comportamiento. Por su parte, a pesar que $T_1(t)$ presenta media constante se tiene que por las características del proceso y las interacciones que se llevan a cabo en él $T_4(t)$ y $T_6(t)$ responden a los cambios descritos por $f_1(t)$. Esto se ve reflejado de igual manera en las concentraciones monitoreadas. En adición, se destaca el efecto que tiene sobre el comportamiento de las variables el flujo de la línea 1 cuando toma valores de $50 ft^3/min$, principalmente en temperatura y concentración.

A pesar que se tiene conocimiento que son tres los estados inducidos mediante $f_1(t)$, se realiza un análisis de correlación lineal entre las variables en X para determinar el número de estados y la selección de las variables que los representarán como alternativa de solución dado que los estados se desconozcan. Los coeficientes de correlación obtenidos se presentan en la Tabla 4.3. Aquí se puede observar que $f_o(t)$, $T_1(t)$, $w(t)$ y $C_{A1}(t)$ forman un grupo altamente correlacionado. Por su parte $f_4(t)$ y $f_6(t)$ muestran coeficientes similares cuando se comparan con las variables restantes. En el caso de $T_4(t)$ y $T_6(t)$ se ve que éstas también presentan relaciones similares con las demás variables

monitoreadas. En general, se observan relaciones entre variables que se encuentran correlacionadas con las demás de manera similar.

Tabla 4.3. Coeficientes de correlación lineal entre las variables monitoreadas.

f_1	f_o	T_1	w	C_{A1}	f_4	T_4	C_{A4}	C_{B4}	C_{C4}	f_6	T_6	C_{A6}	C_{B6}	C_{C6}	Var
1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,97	-0,87	0,95	-0,97	-0,97	0,95	-0,90	-0,80	0,80	0,80	f_1
	1,00	0,96	1,00	0,98	0,00	-0,01	0,03	0,00	0,00	0,00	-0,01	-0,01	0,01	0,01	f_o
		1,00	0,96	0,99	0,00	-0,01	0,02	0,00	0,00	0,00	-0,01	-0,01	0,01	0,01	T_1
			1,00	0,98	0,00	-0,01	0,03	0,00	0,00	0,00	-0,01	-0,01	0,01	0,01	w
				1,00	0,00	-0,01	0,02	0,00	0,00	0,00	-0,01	-0,01	0,01	0,01	C_{A1}
					1,00	-0,93	0,94	-0,96	-0,96	1,00	-0,96	-0,87	0,87	0,87	f_4
						1,00	-0,86	0,88	0,88	-0,93	0,98	0,90	-0,89	-0,89	T_4
							1,00	-0,98	-0,98	0,92	-0,89	-0,74	0,76	0,76	C_{A4}
								1,00	1,00	-0,94	0,90	0,76	-0,76	-0,76	C_{B4}
									1,00	-0,94	0,90	0,76	-0,76	-0,76	C_{C4}
										1,00	-0,96	-0,89	0,89	0,89	f_6
											1,00	0,94	-0,93	-0,93	T_6
												1,00	-0,99	-0,99	C_{A6}
													1,00	1,00	C_{B6}
														1,00	C_{C6}

Se pretende evitar seleccionar variables redundantes que aporten información similar de la operación del proceso. Para ello y con base en el análisis de correlación presentado en la Tabla 4.3, se determinan grupos de éstas que tengan como característica común una correlación de por lo menos 85% con las mismas variables. Esta clasificación se muestra en la Tabla 4.4. Cada grupo indica aquellas variables monitoreadas que presentan una alta correlación no sólo entre ellas sino que también exhiben relaciones similares con otras variables.

Tabla 4.4. Grupos de variables con coeficientes de correlación similares.

Grupo 1	$f_1(t)$	$C_{A4}(t)$	$C_{B4}(t)$	$C_{C4}(t)$
Grupo 2	$f_o(t)$	$T_1(t)$	$w(t)$	$C_{A1}(t)$
Grupo 3	$f_4(t)$	$T_4(t)$	$f_6(t)$	$T_6(t)$
Grupo 4	$C_{A6}(t)$	$C_{B6}(t)$	$C_{C6}(t)$	

A cada grupo obtenido se le aplica método de agrupamiento sustractivo, técnica con aprendizaje no supervisado para determinar los centroides de las clases presentes en los datos. De aquí se determinan los estados de operación obtenidos para cada grupo. Los resultados se muestran en la Tabla 4.5.

Tabla 4.5. Relación de centroides de estados de operación por grupo de variables.

<i>Grupo 1</i>	$f_1(t)$	$C_{A4}(t)$	$C_{B4}(t)$	$C_{C4}(t)$
	[108.523	1.432	0.565	0.282]
	[50.702	1.2942	0.8523	0.4262]
	[79.200	1.3684	0.6980	0.349]
<i>Grupo 2</i>	$f_o(t)$	$T_1(t)$	$w(t)$	$C_{A1}(t)$
	[30.030	125.001	122.030	1.701]
<i>Grupo 3</i>	$f_4(t)$	$T_4(t)$	$f_6(t)$	$T_6(t)$
	[80.231	134.645	48.285	102.641]
	[109.676	131.111	76.547	95.643]
	[50.076	145.064	19.184	120.427]
<i>Grupo 4</i>	$C_{A6}(t)$	$C_{B6}(t)$	$C_{C6}(t)$	
	[0.489	2.541	1.270]	

Como ruta alterna se prueban los datos contenidos en X correspondientes a cada grupo especificado en la Tabla 4.4 y se entrena una red neuronal de mapa auto-organizado para cada grupo con una topología hextop, 1000 iteraciones y un arreglo de dos dimensiones 12x12. Como resultado del entrenamiento de los mapas se presentan en la Figura 4.4 las distancias entre las neuronas para visualizar la estructura de organización de los grupos dado un espacio en alta dimensión. Aquí, los hexágonos azules representan las neuronas, las líneas rojas sirven de conectores entre las neuronas vecinas y sobre estas líneas se establecen colores indicando la lejanía o cercanía entre neuronas; colores oscuros representan largas distancias y los claros cortas distancias.

Los resultados mostrados en la Figura 4.4 corroboran los presentados en la Tabla 4.5 en el caso del grupo 1 y 3 en donde se identifican tres zonas de operación, más marcadas en la Figura 4.4(a) que en la Figura 4.4(c). Por su parte se observa que para el grupo 2 en la Figura 4.4(b) el resultado del mapa auto-organizado no arroja grupos definidos, se observa una ligera separación entre dos grupos pero no representativo para todos los datos. En

adición, para el grupo 4 la Figura 4.4(d) presenta indicios de formación de dos clases de datos en vez de uno como se mostró en la Tabla 4.5.

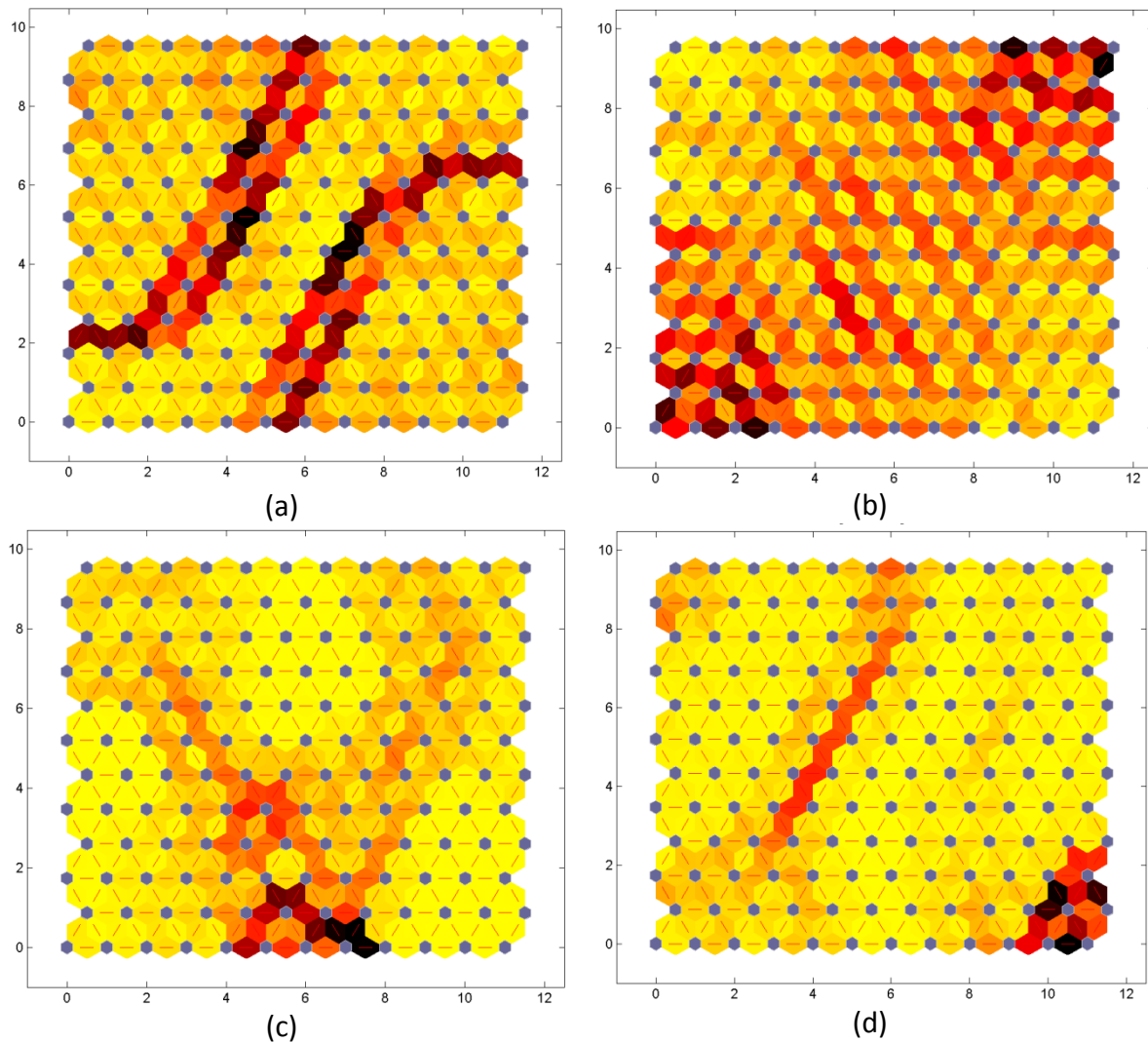


Figura 4.4. Distancias entre neuronas vecinas en mapas auto-organizados de cada grupo de variables. (a) Grupo 1. (b) Grupo 2. (c) Grupo 3. (d) Grupo 4.

A pesar que existen algunas diferencias entre los resultados del método de agrupamiento sustractivo y los mapas auto-organizados para los grupos 2 y 4, se tiene que para los grupos 1 y 3 muestran semejanzas en sus resultados. En adición a este hecho, los grupos 1 y 3 tienen la particularidad de contar con el mayor número de estados identificados por lo que se presta especial atención a las variables pertenecientes a estos grupos.

Luego de reducir las posibilidades de selección entre todas las variables monitoreadas se restringe el análisis sólo a aquellas pertenecientes al grupo 1 y 3. Dado que estos grupos

contienen variables similares entre sí la escogencia de una de ellas se considera representativa de todo el grupo. Para ello se debe tener en cuenta la confiabilidad en la medición, problemas de comunicación, rangos de operación, entre otros. Debido a que la validación de la estrategia de detección híbrida se realiza en un ambiente de simulación se analizan estas variables en la Figura 4.2 para un análisis visual discriminatorio. En el caso de las variables pertenecientes al grupo 1 se descarta el uso de $f_1(t)$ debido a que los estados que describen se especifican de forma ideal con transiciones rígidas. Se observa un comportamiento más ruidoso en $C_{A4}(t)$, mientras que $C_{B4}(t)$ y $C_{C4}(t)$ tienen una forma de señal similar siendo $C_{B4}(t)$ preferida por presentar mayor rango de operación. Para las variables del grupo 3 se descartan $T_4(t)$ y $T_6(t)$ por la cercanía entre dos de sus estados, dejando $f_4(t)$ y $f_6(t)$ como las opcionadas. De aquí, $f_4(t)$ es atractiva por su ubicación en el proceso de caso de estudio considerándose como una variable intermedia representativa de la operación. Sin embargo esta representación en la línea 4 se refleja mediante $C_{B4}(t)$ por lo que se escoge $f_6(t)$ como segundo referente para la clasificación de los estados de operación, asegurando también considerar la dinámica en la transición para varios puntos de medición.

4.3.2. Fase de entrenamiento - SVM

De la identificación de los estados de operación del proceso en estudio se determinó que son tres los escenarios posibles. Con base en esto y debido a que las SVM son clasificadores binarios se requieren por lo menos entrenar dos de éstas. Otras alternativas consideran entrenar tantas SVM como clases se tengan, sin embargo en este caso se puede evitar entrenar la tercera si se incluye una lógica de decisión adecuada.

Los tres estados de operación pueden denominarse bajo, medio y alto respectivamente para cada condición de trabajo de $f_1(t)$ correspondientes a 50, 80 y $110 ft^3/min$. La evaluación de la función signo aplicada al resultado obtenido de la frontera de decisión en (3.30) para cada SVM determina la clasificación del vector de observación \mathbf{u} que contiene el valor puntual de $f_6(t)$ y $C_{B4}(t)$ en un tiempo t dado. Una SVM es usada para clasificar \mathbf{u} entre los estados bajo y medio con frontera de decisión $f_{bajo-medio}(\mathbf{u})$, y otra para clasificar entre los estados medio y alto con frontera de decisión $f_{medio-alto}(\mathbf{u})$. Para los estados de operación cada SVM se diseña de modo que la clasificación resulte como se muestra en la Tabla 4.6 y con base en esto se emplea la lógica de decisión de la Figura 4.5 para determinar el estado actual.

Tabla 4.6. Resultados de clasificación de dos SVM para cada estado de operación.

Estado de Operación		$f_{bajo-medio}(\mathbf{u})$	$f_{medio-alto}(\mathbf{u})$
Bajo	1	-1	-1
Medio	2	+1	-1
Alto	3	+1	+1

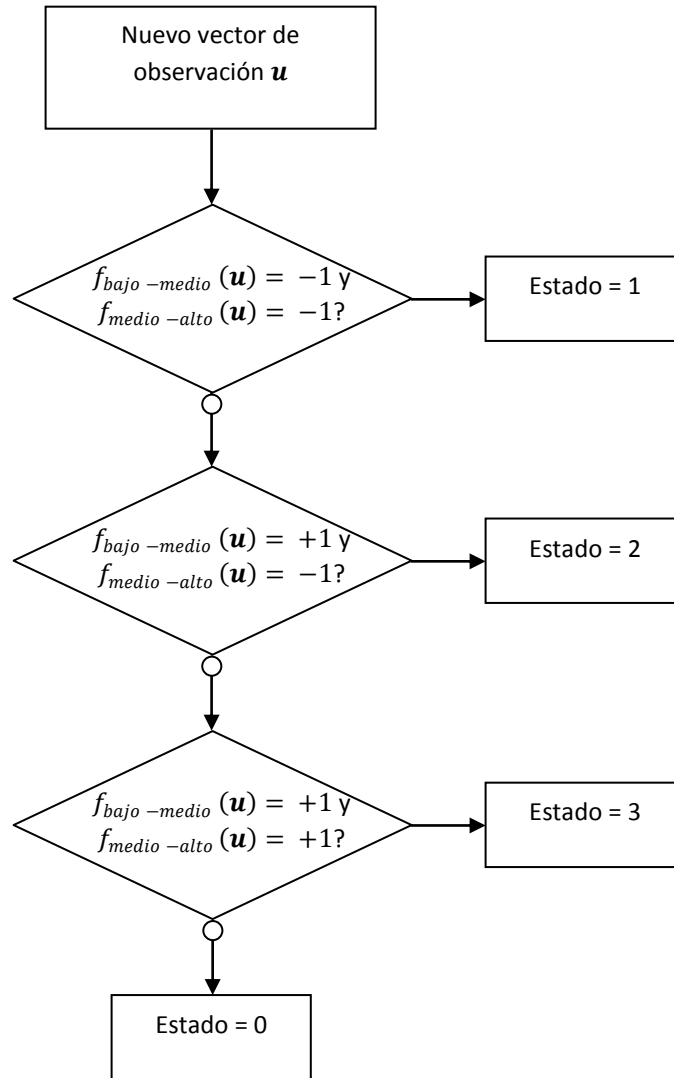


Figura 4.5. Lógica de decisión para determinar estado actual de operación.

Para determinar los parámetros requeridos en la definición de cada frontera de decisión se consideran 200 muestras por estado de operación, considerando que la aproximación $n = 10 * m$ sugiere un mínimo de 150 para un error relativo bajo entre el conjunto muestra y la población. La asignación de la clase correspondiente se realiza de acuerdo con la Tabla 4.6. Para cada par de estados de operación se entrenó un SVM considerando

separabilidad lineal y separabilidad lineal difusa como se presentó en la sección 3.2.2. La evaluación de desempeño se realizó mediante la técnica de Validación Cruzada con 10 iteraciones permitiendo evaluar la capacidad de generalización de cada clasificador mediante la determinación de la tasa de error de clasificación. Aquí, en cada iteración se toma el 90% de los datos para entrenamiento y el 10% restante para prueba de modo que a la décima iteración todos los datos hayan sido utilizados para probar la clasificación. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 4.7.

Tabla 4.7. Desempeño de SVM's basado en la tasa de error de clasificación.

Clasificador de estados bajo y medio	Tipo	Número Vectores de Soporte	Tasa de error de clasificación
	Separable linealmente	2	0
	No separable ($C = 1$)	37	0
	No separable ($C = 10$)	12	0
	No separable ($C = 100$)	2	0
	No separable ($C = 1000$)	2	0
Clasificador de estados medio y alto	Tipo	Número Vectores de Soporte	Tasa de error de clasificación
	Separable linealmente	2	0
	No separable ($C = 1$)	65	0
	No separable ($C = 10$)	22	0
	No separable ($C = 100$)	4	0
	No separable ($C = 1000$)	2	0

En la Tabla 4.7 se observa el efecto que tiene la variable de penalización C sobre la región de separación difusa y por ende sobre el número de vectores de soporte, siendo éstos mayores a un menor valor de C . Estos resultados también demuestran que los estados de operación identificados para el caso de estudio son linealmente separables y que valores de la función de la frontera de decisión ubicados entre $+1$ y -1 corresponden a zonas de transición. La Tabla 4.8 resume los parámetros obtenidos luego del entrenamiento de los clasificadores linealmente separables. La implementación de los clasificadores de la Tabla 4.8 para una secuencia de estados como la presentada en la Figura 4.2 arroja como resultado el comportamiento que se observa en la Figura 4.6. La lógica de decisión presentada en la Figura 4.5 se evidencia en la Figura 4.6 donde se observa que clasifica los estados de operación adecuadamente conforme a la secuencia estipulada en la Figura 4.2.

Tabla 4.8. Parámetros de fronteras de decisión de clasificadores de estados de operación.

Clasificador	Bajo- Medio	Medio- Alto
Vectores de soporte (\mathbf{u}_k)	$[-0.966, 0.777; 0.983, -0.8939]$	$[-0.974, 0.880; 0.985, -0.954]$
Multiplicadores de Lagrange (β)	$[0.3031; 0.3031]$	$[0.2774; 0.2774]$
Clasificación de $\mathbf{u}_k(\mathbf{y}_k)$	$[+1; -1]$	$[+1; -1]$
Ordenada al origen (b)	0.0344	0.0221
Media (\bar{x})	$[-33.679; -0.771]$	$[-62.740; -0.626]$
Desviación estándar (s)	$[14.6413; 0.0774]$	$[14.4509; 0.0677]$

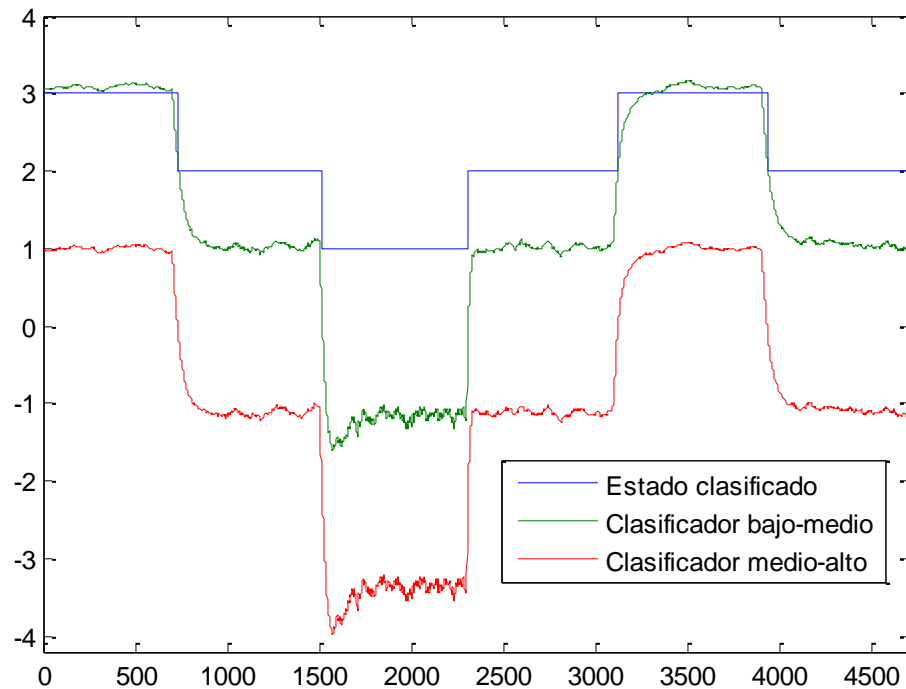


Figura 4.6. Resultados de clasificación para una secuencia de estados de operación.

En adición se muestra en la Figura 4.7 el comportamiento de los dos clasificadores en un caso particular de transición de estados. Esta figura junto con la Figura 4.6 corroboran los resultados presentados en la Tabla 4.7 donde se encontró que los estados eran linealmente separables y que para zonas de transición la función de la frontera de decisión arrojaba valores entre $+1$ y -1 . Es por ello que para abordar el tratamiento de esta zona se propone dividir la zona con la creación de rangos. Esto permite extraer propiedades como la media y la desviación estándar de las variables monitoreadas en estos rangos para evitar grandes desviaciones entre los estadísticos para monitoreo y que éstas se confundan con fallas en el proceso cuando en realidad son debida a transiciones entre los estados.

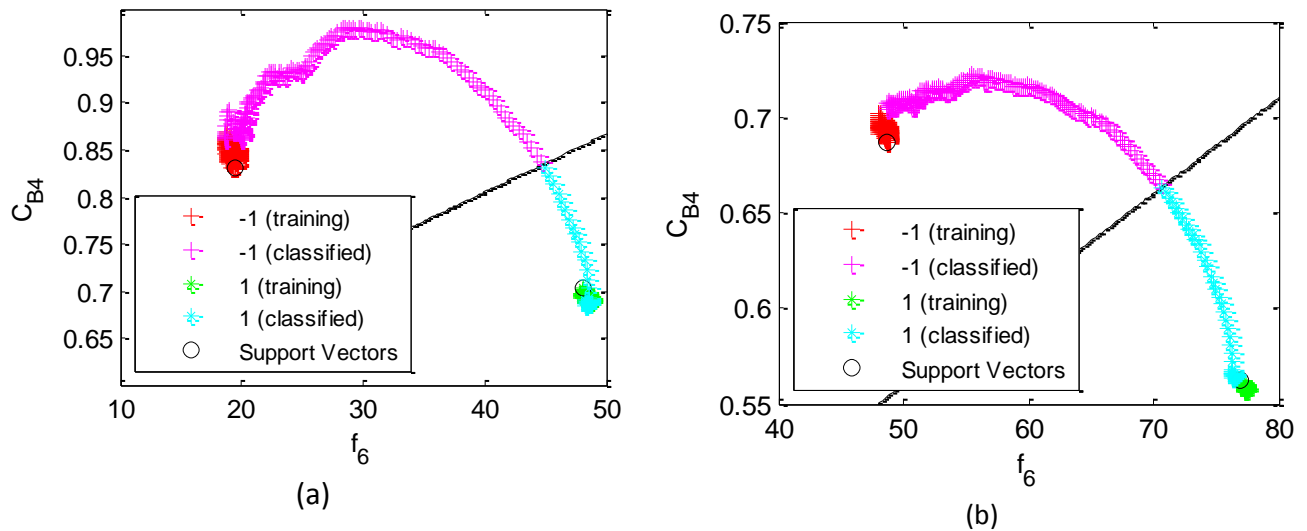


Figura 4.7. Resultados de clasificación para zonas de transición. (a) Estado de medio a bajo. (b) Estado de alto a medio.

Debido a la variabilidad inducida en el proceso de caso de estudio en un estado de operación especificado la función de frontera de decisión no siempre arroja valores mayores que +1 o menores que -1 de manera estricta. Este comportamiento se tiene en cuenta para determinar los valores de los rangos de transición próximos a los estados de operación. Esto es, se emplea un rango de operación normal de los estados descrito por la función de frontera de decisión de modo que reúna cerca del 95% de los datos en este estado. Con base en esta consideración se evalúan estos rangos de operación normal en los estados de acuerdo con los datos de entrenamiento X ; esta información se muestra en la Tabla 4.9.

Tabla 4.9. Rangos de operación normal basados en funciones de frontera de decisión.

Estado	Bajo	Medio		Alto
Función	$f_{bajo-medio}(u)$	$f_{bajo-medio}(u)$	$f_{medio-alto}(u)$	$f_{medio-alto}(u)$
Media	-1.1489	1.0345	-1.1001	1.0083
Desviación Estándar	0.0693	0.0419	0.0453	0.0305
Límite superior	-1.0103	1.1183	-1.0095	1.0693
Límite inferior	-1.2875	0.9507	-1.1907	0.9473

Teniendo en cuenta la información de la Tabla 4.9 se tiene que entre mayor sea el número de rangos mejor estará definida la dinámica de transición. Sin embargo esto está sujeto a la cantidad de datos experimentales que se tengan del proceso en estudio, dado que esto determinará la confiabilidad de las propiedades extraídas de estos rangos. En este caso se tiene que para las 43200 observaciones de la condición normal con estados de operación

una división equitativa de 6 rangos para la zona de transición de estado medio-alto entre -1.0103 y 0.9507 y una división equitativa de 5 rangos para el caso de la transición de estado bajo-medio entre -1.0095 y 0.9473 conllevan datos superiores a 150 muestras en cada uno, mínimo aproximado de muestras para $m = 15$. En adición, considerando los límites presentados en la Tabla 4.9 se observa que en este caso particular el clasificador bajo-medio arroja valores hasta -1.685 en su función de frontera de decisión para los datos de entrenamiento X , valor por debajo del su límite inferior como se nota en la Figura 4.6. Esto hace necesario considerar esta zona también como transición. Teniendo en cuenta las distancias equitativas de este clasificador, de 0.3913 , conduce a la creación de 1 rango adicional entre -1.2875 y -1.685 .

4.3.3. Pre-procesamiento de datos

El enfoque híbrido de detección de fallas implica un análisis individual del comportamiento del proceso dependiendo de su estado de operación. El conjunto de datos representativos de la condición normal, $X \in \mathbb{R}^{43200 \times 15}$, considera tres estados identificados previamente en la sección 4.3.1. Para cada subconjunto de muestras correspondientes a los estados se requiere extraer información de su media y desviación estándar de acuerdo con (3.3) en miras a la estandarización de las observaciones en la fase de detección. Estos subconjuntos se determinan de acuerdo con los límites superior e inferior de las funciones de frontera de decisión estipuladas en la Tabla 4.9. Con base en los número de observaciones de cada subconjunto, $n_{bajo} = 11767$, $n_{medio} = 11435$ y $n_{alto} = 11589$, en las variables monitoreadas $m = 15$ y un nivel de significancia $\alpha = 0.01$ se tiene un error relativo para cada estado de acuerdo con (3.2) de:

$$\begin{aligned}\epsilon_{bajo} &= 2.025 \times 10^{-3} = 0.2025\% \\ \epsilon_{medio} &= 2.084 \times 10^{-3} = 0.2084\% \\ \epsilon_{alto} &= 2.057 \times 10^{-3} = 0.2057\%\end{aligned}\tag{4.5}$$

Esto sugiere una semejanza entre los subconjuntos de X y un conjunto infinito de datos con un error pequeño. No se presenta el caso en que variables aisladas, con varianza cero ó puntos atípicos tengan que ser removidos.

4.3.4. Fase entrenamiento - PCA

La aplicación de PCA para la reducción de dimensionalidad se realiza para cada subconjunto de X , previamente estandarizado. La descomposición en eigenvalores y eigenvectores de la matriz de covarianza S a partir de (3.5) permite obtener $V \in \mathbb{R}^{15 \times 15}$ y $\Lambda \in \mathbb{R}^{15 \times 15}$ para cada subconjunto de X . La retención de los eigenvalores que expliquen por lo menos el 95% de la variabilidad contenida en esta matriz dada por (3.6) determina los a primeros vectores columna en los vectores de carga V usados para la proyección de los subconjuntos de X en el espacio reducido. De esta manera en la reducción de dimensionalidad se obtienen valores de $a = 5$ para cada subconjunto, conformando para cada uno la matriz de carga $P \in \mathbb{R}^{15 \times 5}$. A partir de las matrices de carga obtenidas para cada subconjunto se determinan respectivamente la matriz objetivo T y la matriz residual E con (3.8) y (3.10) de modo que $T_{bajo} \in \mathbb{R}^{11767 \times 5}$, $T_{medio} \in \mathbb{R}^{11435 \times 5}$, $T_{alto} \in \mathbb{R}^{11589 \times 5}$, $E_{bajo} \in \mathbb{R}^{11767 \times 15}$, $E_{medio} \in \mathbb{R}^{11435 \times 15}$ y $E_{alto} \in \mathbb{R}^{11589 \times 15}$. De acuerdo con (3.11) y (3.12) los umbrales estadísticos para cada estado son:

$$T_{0.01_{bajo}}^2 = 15.1004; T_{0.01_{medio}}^2 = 15.1009; T_{0.01_{alto}}^2 = 15.1007 \quad (4.6)$$

$$Q_{0.01_{bajo}} = 2.248; Q_{0.01_{medio}} = 3.3382; Q_{0.01_{alto}} = 2.7090 \quad (4.7)$$

Por su parte, la respuesta de los estadísticos T^2 y Q para cada estado calculados con (3.13) y (3.14) se muestra en la Figura 4.8 para una secuencia alto-medio-bajo.

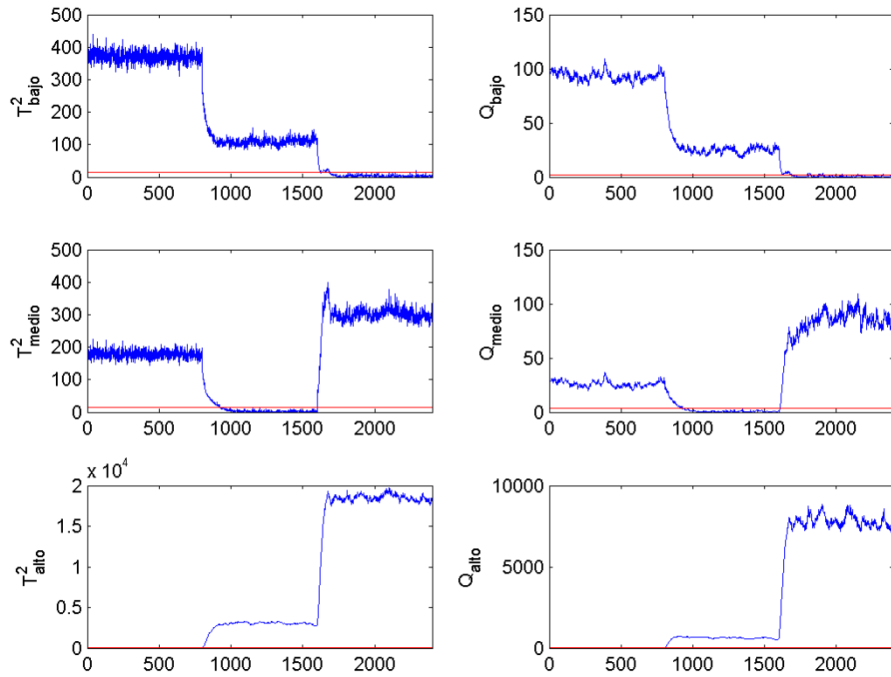


Figura 4.8. Estadísticos T^2 y Q para cada estado de operación.

En adición, para el caso del enfoque híbrido se presentan en la Tabla 4.10 la verificación de propiedades que deben cumplir los componentes principales o vectores columna de la matriz objetivo para cada estado de operación.

Tabla 4.10. Verificación de propiedades componentes principales en enfoque híbrido.

$Var(t_1) \geq Var(t_2) \geq Var(t_3) \geq Var(t_4) \geq Var(t_5)$ $Media(t_i) = 0; \forall i$ $t_i^T t_k = 0; \forall i \neq k$					
t_i	t_1	t_2	t_3	t_4	t_5
Var_{bajo}	4.231	3.970	3.620	1.788	0.9709
Var_{medio}	6.616	3.955	1.754	1.135	0.978
Var_{alto}	6.910	3.955	1.492	1.184	0.988
$Media_{bajo}$	-5.76×10^{-13}	-6.81×10^{-13}	3.82×10^{-14}	-6.47×10^{-13}	9.38×10^{-14}
$Media_{medio}$	2.82×10^{-12}	1.55×10^{-13}	-7.53×10^{-13}	-4.17×10^{-12}	-1.28×10^{-12}
$Media_{alto}$	2.58×10^{-13}	2.71×10^{-13}	-1.54×10^{-13}	-1.88×10^{-12}	-1.30×10^{-13}
t_{1-bajo}^T	4.611×10^4	2.046×10^{-12}	3.035×10^{-11}	-4.774×10^{-12}	-3.261×10^{-12}
t_{2-bajo}^T	2.046×10^{-12}	4.327×10^4	7.190×10^{-12}	1.983×10^{-11}	1.789×10^{-11}
t_{3-bajo}^T	3.035×10^{-11}	7.190×10^{-12}	3.945×10^4	6.025×10^{-12}	1.563×10^{-12}
t_{4-bajo}^T	-4.774×10^{-12}	1.983×10^{-11}	6.025×10^{-12}	1.949×10^4	1.558×10^{-11}
t_{5-bajo}^T	-3.261×10^{-12}	1.789×10^{-11}	1.563×10^{-12}	1.558×10^{-11}	1.058×10^4
$t_{1-medio}^T$	7.211×10^4	-7.133×10^{-12}	-1.551×10^{-11}	1.861×10^{-12}	1.591×10^{-12}
$t_{2-medio}^T$	-7.133×10^{-12}	4.310×10^4	2.151×10^{-11}	-6.455×10^{-12}	9.087×10^{-12}
$t_{3-medio}^T$	-1.551×10^{-11}	2.151×10^{-11}	1.911×10^4	-4.646×10^{-12}	3.417×10^{-12}
$t_{4-medio}^T$	1.861×10^{-12}	-6.455×10^{-12}	-4.646×10^{-12}	1.237×10^4	-9.777×10^{-12}
$t_{5-medio}^T$	1.591×10^{-12}	9.087×10^{-12}	3.417×10^{-12}	-9.777×10^{-12}	1.066×10^4
t_{1-alto}^T	7.739×10^4	2.216×10^{-12}	7.276×10^{-12}	-1.864×10^{-11}	9.009×10^{-12}
t_{2-alto}^T	2.216×10^{-12}	4.430×10^4	-1.507×10^{-11}	1.378×10^{-12}	-3.069×10^{-12}
t_{3-alto}^T	7.276×10^{-12}	-1.507×10^{-11}	1.671×10^4	-1.102×10^{-11}	1.289×10^{-11}
t_{4-alto}^T	-1.864×10^{-11}	1.378×10^{-12}	-1.102×10^{-11}	1.327×10^4	9.151×10^{-12}
t_{5-alto}^T	9.009×10^{-12}	-3.069×10^{-12}	1.289×10^{-11}	9.151×10^{-12}	1.107×10^4

En la Figura 4.8 se tiene que para condiciones distintas a las especificadas por el estado del estadístico utilizado se determinan fallas en la operación. Es por esto que para el

conjunto de entrenamiento X si se unifican los resultados individuales de cada estado con base en la lógica de decisión de la Figura 4.5 se obtiene como resultado una gráfica de monitoreo que se adapta a los estados de operación del proceso de forma rígida. Esto se muestra en la Figura 4.9 en donde se observa las grandes desviaciones en las transiciones. Para ello se muestra en la Figura 4.10 el tratamiento en estas zonas dada por los rangos estipulados en la sección 4.3.2.

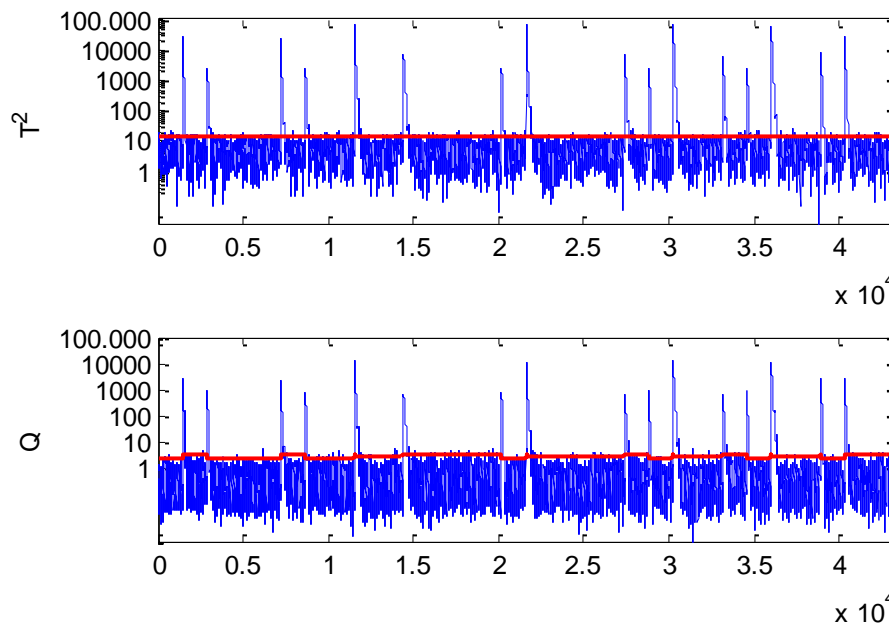


Figura 4.9. T^2 y Q para conjunto de datos X y transiciones rígidas.

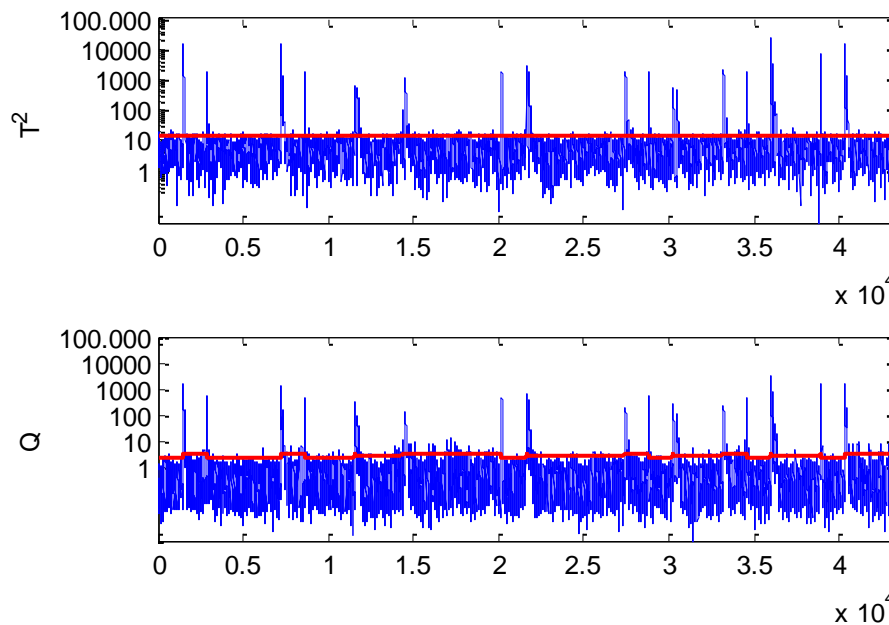


Figura 4.10. T^2 y Q para conjunto de datos X y tratamiento en transiciones.

A pesar que el tratamiento que se aplica a las zonas de transición mejoran las desviaciones que se presentan en los estadísticos, éstas siguen considerándose muy altas. Es por ello que se opta por fragmentar aún más las zonas de transición entre estados para tener una mejor representación de la media y desviación estándar de los datos en cada rango. La Figura 4.11 muestra el comportamiento de respuesta de los estadísticos ante el conjunto de datos X . Esto se logra con una división equitativa de 9 rangos para la zona de transición de estado medio-alto entre -1.0103 y 0.9507 y una división equitativa de 8 rangos para el caso de la transición de estado bajo-medio entre -1.0095 y 0.9473 se tienen datos superiores a 60 muestras en cada uno. Además, de acuerdo con esto para el clasificador bajo-medio entre -1.2875 y -1.685 se tiene la creación de 3 rangos equitativos.

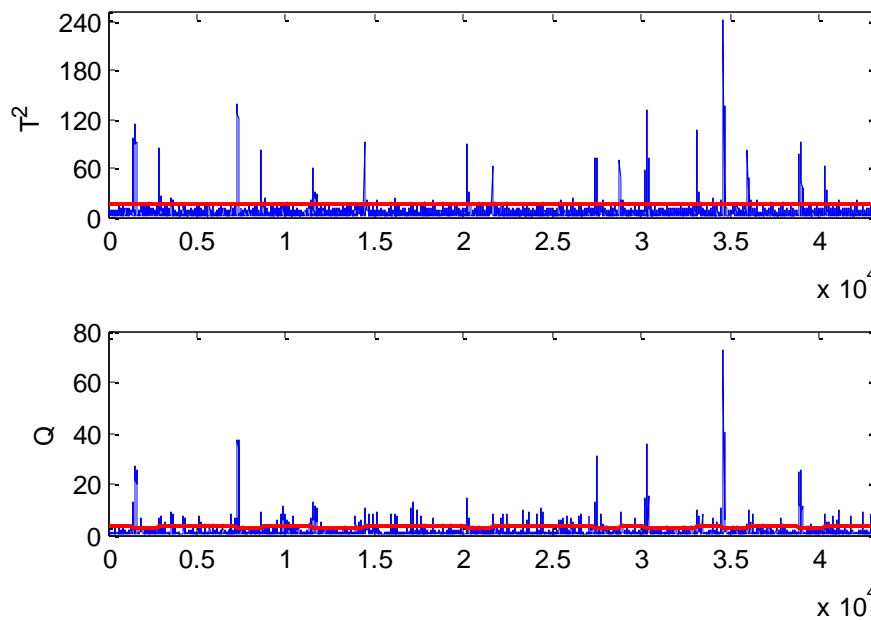


Figura 4.11. T^2 y Q para conjunto de datos X y mayor rangos en transiciones.

Incrementar los rangos en las zonas de transición podrían mejorar las desviaciones en las transiciones pero produce un menor número de muestras por rangos para determinar la media y la desviación estándar de los datos y con esto menor capacidad de generalización. Debido al comportamiento observado en la Figura 4.11 en contraste con la Figura 4.10 se tiene que para la estandarización de los datos en zonas de transición se escogen los nuevos rangos usados en la Figura 4.11.

4.4. Fase de detección: Enfoque tradicional e híbrido

En el proceso de caso de estudio se consideran fallas asociadas a instrumentación así como fallas de proceso para realizar un análisis comparativo entre estos dos enfoques.

4.4.1. Falla 1: Pérdida de calor en el reactor

La evaluación de los estadísticos de monitoreo para cada estado de operación se realiza mediante la inducción de una falla en la observación 1000 de la escala de tiempo, correspondiente a una pérdida de calor en el reactor asociada al 6% del valor de transferencia en condición normal de operación, esto es, $5 \times 10^3 \text{ BTU/min}$ con una constante de tiempo de 30 min. Las Figuras 4.12, 4.13 y 4.14 muestran los resultados para la aplicación de la falla en cada estado de operación.

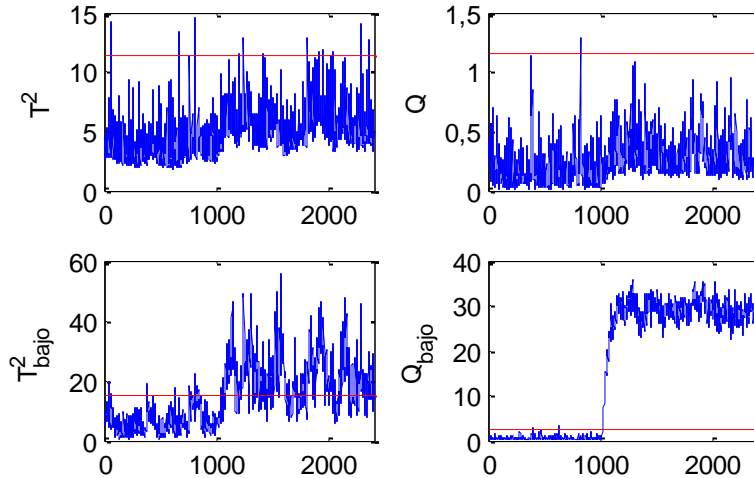


Figura 4.12. Estadísticos de monitoreo para falla 1 y estado bajo.

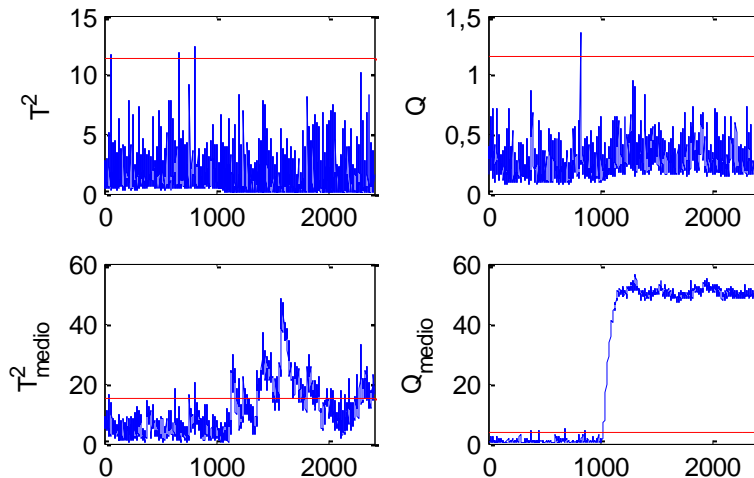


Figura 4.13. Estadísticos de monitoreo para falla 1 y estado medio.

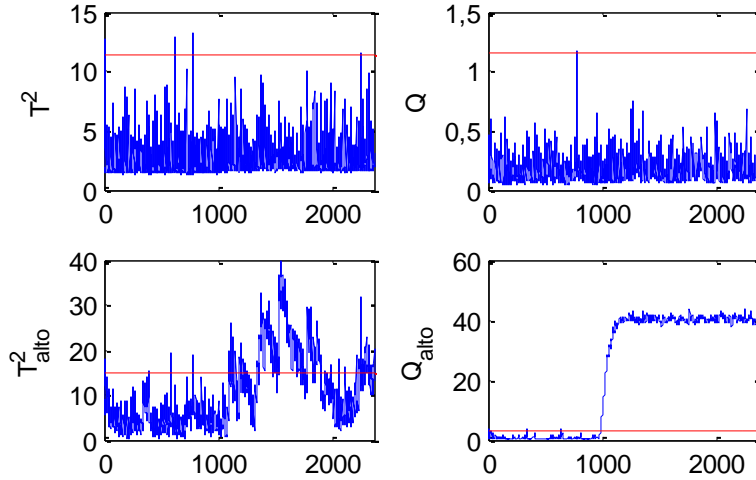


Figura 4.14. Estadísticos de monitoreo para falla 1 y estado alto.

En los tres escenarios descritos por los estados de operación el enfoque tradicional se muestra insensible ante los efectos de la falla 1 inducida. Por su parte el enfoque híbrido posterior identificación del estado y aplicación de operaciones correspondientes arroja resultados favorables en el sentido que tanto el comportamiento sistemático representado por el estadístico T^2 como el residual por Q se ven afectados por la desviación.

Por su parte, la Figura 4.15 muestra una pérdida de calor mayor en la condición de estado bajo, $16.5 \times 10^3 \text{ BTU}/\text{min}$ (20%) y una constante de tiempo de 60 min.

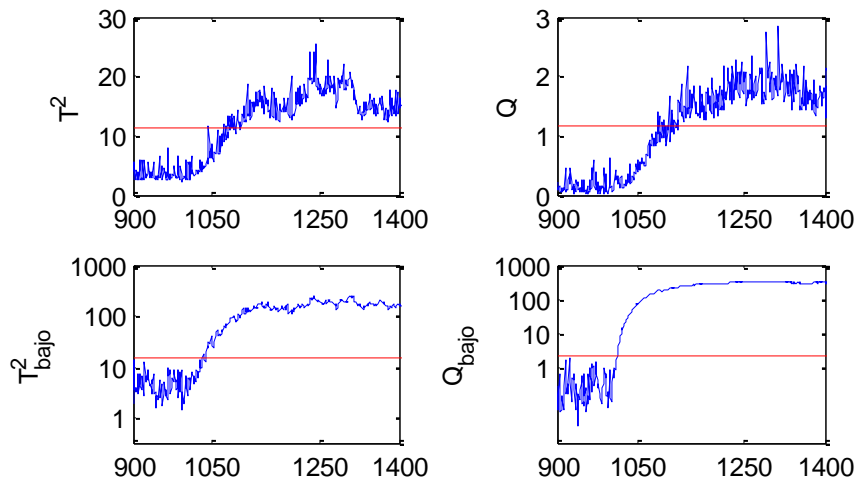


Figura 4.15. Estadísticos de monitoreo para modificación de falla 1 y estado bajo.

Se observa en el nuevo caso que para que el enfoque tradicional detectara la falla se tuvo que incrementar su magnitud considerablemente. A pesar de ello, el enfoque híbrido

muestra un T^2 superior al umbral en la observación 39 posterior a la falla, en contraste con el enfoque tradicional que supera completamente el umbral de condición normal en la observación 106. Asimismo para el espacio residual el límite es superado en la observación 14 para el enfoque híbrido mientras que éste es superado en el tradicional en la observación 127. Dado la escala de tiempo del proceso, esto se traduce en detección de fallas en el orden de los minutos en contraste con detección en el orden de horas.

4.4.2. Falla 2: Taponamiento válvula línea 4

Se considera una condición atípica en la válvula manual ubicada en la línea 4 en la observación 900. En particular, se simula un taponamiento de la misma con una reducción de 30% en su capacidad. Las Figuras 4.16, 4.17 y 4.18 muestran los resultados obtenidos.

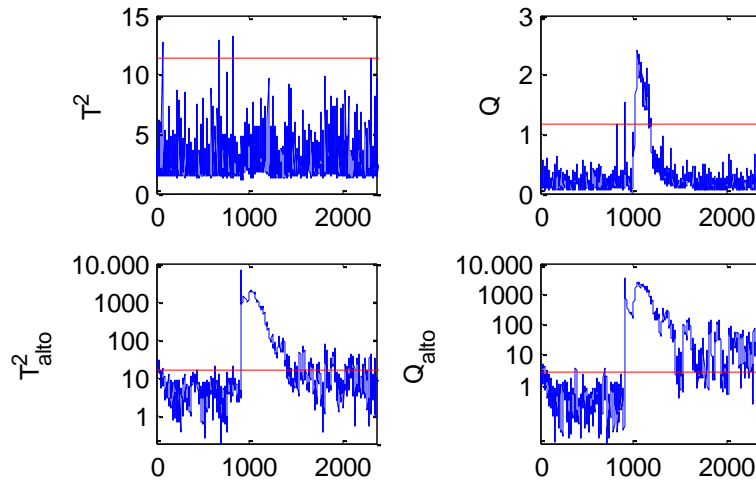


Figura 4.16. Estadísticos de monitoreo para falla 2 y estado alto.

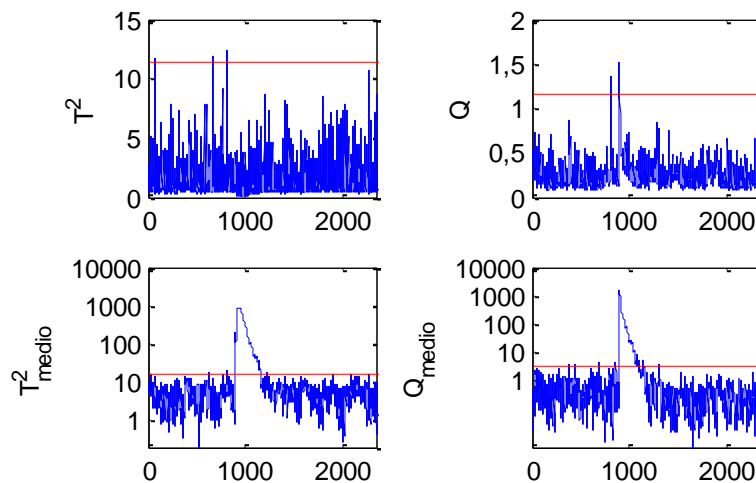


Figura 4.17. Estadísticos de monitoreo para falla 2 y estado medio.

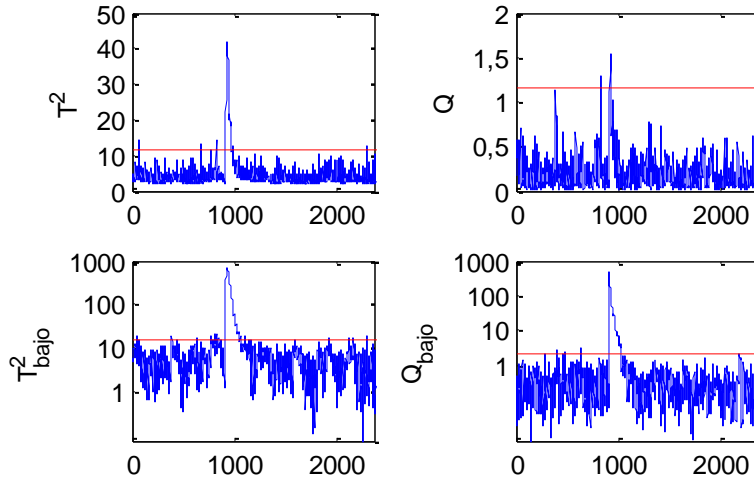


Figura 4.18. Estadísticos de monitoreo para falla 2 y estado bajo.

La falla 2 evaluada en los tres estados de operación refleja que la implementación del enfoque tradicional presenta comportamientos diferentes dependiendo del estado. En la Figura 4.16 cuando la falla es inducida en el estado alto, el subespacio descriptor de la tendencia sistemática del proceso no se ve afectado por más que falsas alarmas en el T^2 mientras que para la tendencia residual si notifica la ocurrencia de la falla a través del estadístico Q . Caso contrario ocurre en la Figura 4.18 donde la notificación se realiza mediante el T^2 y las falsas alarmas mediante Q . En contraste con los escenarios anteriores, para el estado medio el enfoque tradicional no detecta la ocurrencia de la falla como se observa en la Figura 4.17.

Diferentes escenarios son visualizados cuando se implementa el enfoque híbrido. Aquí, para todos los estados de operación la falla es detectada tanto en el subespacio sistemático como para el subespacio residual. Este comportamiento denota la importancia de dividir el análisis para cada estado de operación del proceso en miras de incrementar su sensibilidad ante fallas dependientes del estado. El enfoque tradicional realiza detección cuando el taponamiento en la válvula se lleva a cabo en los estados extremo, bajo y alto, mientras que en el estado medio pasa desapercibido. Esto conduce a que la falla al no afectar la variabilidad total de los tres estados no es reconocida por el sistema de monitoreo, perdiendo capacidad de detección.

En adición, en la Figura 4.16 se refleja que a pesar que el proceso se comporta como un sistema autoregulado cuando se le induce la falla 2, los estadísticos persisten indicando que una condición atípica está presente en el proceso. Este comportamiento se debe a que cuando el flujo que pasa por la válvula defectuosa se reduce, se acumula masa en el

tanque de calentamiento lo que conduce a un incremento en la presión sobre la válvula y regulando el flujo a su condición normal de operación. Sin embargo cabe resaltar que el enfoque híbrido detectó la falla en los tres escenarios, y esta información le es útil a los operadores del centro de control para sospechar que algo no está bien y que deben realizar inspecciones sobre el proceso.

Conclusiones y recomendaciones

La automatización de los procesos industriales ha permitido explorar rutas para una mejor implementación del monitoreo de las operaciones. La detección de fallas se constituye en el pilar de los sistemas de supervisión dado que es el procedimiento inicial que indica la condición atípica del proceso y gracias a ello es posible desarrollar las actividades de identificación, diagnóstico y recuperación ante la ocurrencia de una falla. A continuación se presenta las principales conclusiones derivadas del desarrollo del método híbrido de detección de fallas así como recomendaciones que podrían considerarse para trabajos futuros.

Conclusiones

Diferentes rutas de solución permiten definir el número de estados de operación presentes en el proceso. El uso conjunto de herramientas subjetivas como análisis visual del comportamiento del proceso así como el empleo de herramientas más objetivas basadas en agrupamiento con aprendizaje no supervisado permite abordar varias rutas de solución en la definición de los estados de operación. Esto también facilita la toma de decisión al contar con varias sugerencias de números de estados de diferentes fuentes con fundamentación analítica o cualitativa, todas enmarcadas dentro del conocimiento que se tenga del proceso.

El número de clasificadores basados en SVM depende de la cantidad de estados del proceso y de las características del mismo. En el entrenamiento para la clasificación de estados del proceso de caso de estudio, éstas demostraron por qué a pesar de ser una técnica reciente en comparación con otras se ha posicionado fuertemente en el gremio de clasificación de patrones presentando errores de clasificación cero y gran capacidad de generalización, esto con pocos datos de entrenamiento.

Las falsas alarmas en las transiciones entre estados son reducidas mediante la extracción de propiedades en estas zonas. El tratamiento de zonas de transición se abordó con la división de la función de frontera de decisión en partes equitativas considerando los límites superiores e inferiores que describen los estados de operación. La decisión del número de rangos se basó en la cantidad de datos disponibles en cada uno de ellos de modo que las propiedades de media y desviación estándar estén definidas adecuadamente. Se observó que a mayor número de rangos en la zona de transición más

definida estaba la zona de transición a costa de menor número de datos. Esto arrojó resultados favorables en la implementación de los estadísticos T^2 y Q cuando eran aplicados a las zonas de transición con mayor número de rangos.

El tratamiento en zonas de transición permite representar en una sola gráfica univariada el comportamiento multivariado y los estados del proceso. Los estadísticos multivariados reflejan el comportamiento de muchas variables en un gráfico univariado. Mediante la implementación de la estandarización de los datos en zonas de transición con propiedades de ellas permite reducir considerablemente estas desviaciones y recrear una gráfica univariada que represente no sólo las numerosas variables monitoreadas sino también los diferentes estados de proceso.

Considerar los estados de operación para la implementación de PCA aumenta la capacidad de detección y sensibilidad ante la ocurrencia de fallas. La puesta en marcha sobre un caso de estudio de la estrategia híbrida que teoría de reconocimiento de patrones y técnicas de detección de fallas basadas en datos arrojó resultados favorables cuando ésta se compara con el enfoque tradicional que no considera estados de operación para la definición de las matrices de transformación. Se observó que ante fallas de poco impacto en la operación global del proceso el método híbrido las detectó en todos los estados de operación, mientras que el enfoque tradicional careció de sensibilidad y descartó la presencia de fallas. Se requiere entonces magnitudes considerables de las fallas para que el enfoque tradicional detecte su ocurrencia e inclusive en esos casos presenta retrasos en la detección mayores que el enfoque híbrido. Esto sugiere que el análisis de variabilidad individual por estados de operación es de gran utilidad al presentar tiempos de detección menores que pueden hacer la diferencia en muchas situaciones de seguridad en las operaciones. Asimismo, se evidenció que para fallas dependientes del estado de operación la detección mediante el enfoque tradicional estaba sujeta a la ocurrencia de la falla en los estados extremo cercanos a los límites de variabilidad total, fallas en casos intermedios fueron desestimadas, mientras que el enfoque híbrido detectó condiciones atípicas en todos los escenarios.

Recomendaciones

Evaluar la clasificación de los estados con una sola SVM. Para el caso de estudio abordado se tiene que una lógica de decisión que considerara un sólo clasificador y resultados de la función de frontera de decisión no sólo entre -1 y 1 y con rangos de clasificación en vez de evaluación del signo de la función puede ser utilizada de manera alterna con menos parámetros a determinar. Esto no necesariamente significa una mejora en el desempeño

de la clasificación pero reduce las actividades de entrenamiento y recolección de información de las SVM.

Considerar la dinámica de la transición en la determinación de los rangos en estas zonas. Como alternativa a la definición de rangos con divisiones equitativas se podría evaluar estrategias relacionadas con la dinámica de la transición conllevando a rangos finos en zonas de mayor crecimiento y no tanto en pendientes menores.

Evaluar el uso de las matrices de transformación de PCA como alternativa para abordar zonas de transición. Se podría considerar abordar el tratamiento de las zonas de transición no desde el punto de vista de la estandarización sino desde las matrices de transformación de PCA en donde se pueda incorporar capacidades de memoria del estado anterior y atacar falsas alarmas por cambios intempestivos de estado.

Incluir en el método de detección un tratamiento de las falsas alarmas producto de las transiciones entre estados. A pesar que con la estandarización especial que se realiza en las zonas de transición las falsas alarmas se reducen, el manejo de las alarmas generadas en estas zonas pueden ser abordadas como complemento de apoyo en las actividades de monitoreo. Esto sugiere desarrollar estrategias que permitan determinar el grado de pertenencia de las falsas alarmas a un estado de condición atípica o a la transición producto del cambio de estados.

Extrapolar la metodología híbrida desarrollada a otras técnicas de detección de fallas basadas en datos. Gracias a la revisión del estado del arte de las técnicas de detección de fallas basadas en datos se tiene que éstas presentan en sus implementaciones relaciones con PCA y los estadísticos empleados por ésta. Debido a ello, es posible extrapolar la metodología desarrollada en esta investigación para emplearse con técnicas diferentes a PCA para evaluar su desempeño cuando se aplican a procesos con estados de operación.

Considerar realizar actividades de diagnóstico aprovechando la información de estados de operación en el proceso. Aplicaciones en procesos con estados de operación pueden ser abordadas desde el punto de vista de diagnóstico para definición de fallas asociadas a elementos de instrumentación cuando éstas son confundidas con cambios en las operaciones del proceso, como es el caso de las fugas y la descalibración de sensores.

Bibliografía

- [1] R. Isermann. *Fault-Diagnosis Systems*. Germany: Springer-Verlag, 2006.
- [2] E. L. Russell, L. H. Chiang and R. D. Braatz. *Data-Driven Techniques For Fault Detection And Diagnosis In Chemical Processes*. Great Britain: Springer-Verlag, 2000.
- [3] L. H. Chiang, E. L. Russell and R. D. Braatz. *Fault Detection and Diagnosis in Industrial Systems*. Great Britain: Springer-Verlag, 2001.
- [4] M. Misra, H. H. Yue, S. J. Qin and C. Ling, "Multivariate process monitoring and fault diagnosis by multi-scale PCA," *Comput. Chem. Eng.*, vol. 26, pp. 1281-1293, 9/15, 2002.
- [5] J. Lee, C. Yoo and I. Lee, "Statistical process monitoring with independent component analysis," *J. Process Control*, vol. 14, pp. 467-485, 8, 2004.
- [6] H. P. Reddy, S. Narasimhan, S. M. Bhallamudi and S. Bairagi, "Leak detection in gas pipeline networks using an efficient state estimator. Part-I: Theory and simulations," *Comput. Chem. Eng.*, vol. 35, pp. 651-661, 4/7, 2011.
- [7] P. Lopes dos Santos, T. Azevedo-Perdicoúlis, G. Jank, J. A. Ramos and J. L. Martins de Carvalho, "Leakage detection and location in gas pipelines through an LPV identification approach," *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, vol. 16, pp. 4657-4665, 12, 2011.
- [8] H. V. da Silva, C. K. Morooka, I. R. Guilherme, T. C. da Fonseca and J. R. P. Mendes, "Leak detection in petroleum pipelines using a fuzzy system," *Journal of Petroleum Science and Engineering*, vol. 49, pp. 223-238, 12/15, 2005.
- [9] P. Burrell and D. Inman, "An expert system for the analysis of faults in an electricity supply network: problems and achievements," *Comput. Ind.*, vol. 37, pp. 113-123, 9, 1998.
- [10] D. Srinivasan, R. L. Cheu, Y. P. Poh and A. K. C. Ng, "Automated fault detection in power distribution networks using a hybrid fuzzy-genetic algorithm approach," *Eng Appl Artif Intell*, vol. 13, pp. 407-418, 8/1, 2000.
- [11] S. K. Firth, K. J. Lomas and S. J. Rees, "A simple model of PV system performance and its use in fault detection," *Solar Energy*, vol. 84, pp. 624-635, 4, 2010.
- [12] D. R. Morais, J. R. da Silva and J. G. Rolim, "A fuzzy system for detection of incipient faults in transformers based on the dissolved gas analysis of insulating oil," in *Diagnostics for Electric Machines, Power Electronics and Drives, 2005. SDEMPED 2005. 5th IEEE International Symposium on*, 2005, pp. 1-6.

- [13] N. Yadaiah and N. Ravi, "Fault detection techniques for power transformers," in *Industrial & Commercial Power Systems Technical Conference, 2007. ICPS 2007. IEEE/IAS, 2007*, pp. 1-9.
- [14] D. G. Eliades and M. M. Polycarpou, "A Fault Diagnosis and Security Framework for Water Systems," *Control Systems Technology, IEEE Transactions on*, vol. 18, pp. 1254-1265, 2010.
- [15] C. Verde and N. Visairo, "Bank of nonlinear observers for the detection of multiple leaks in a pipeline," in *Control Applications, 2001. (CCA '01). Proceedings of the 2001 IEEE International Conference on*, 2001, pp. 714-719.
- [16] O. Begovich and A. Pizano-Moreno, "Application of a leak detection algorithm in a water pipeline prototype: Difficulties and solutions," in *Electrical Engineering, Computing Science and Automatic Control, 2008. CCE 2008. 5th International Conference on*, 2008, pp. 26-30.
- [17] J. Gertler, J. Romera, V. Puig and J. Quevedo, "Leak detection and isolation in water distribution networks using principal component analysis and structured residuals," in *Control and Fault-Tolerant Systems (SysTol), 2010 Conference on*, 2010, pp. 191-196.
- [18] S. W. Choi and I. Lee, "Nonlinear dynamic process monitoring based on dynamic kernel PCA," *Chemical Engineering Science*, vol. 59, pp. 5897-5908, 12, 2004.
- [19] M. W. Lee, S. H. Hong, H. Choi, J. Kim, D. S. Lee and J. M. Park, "Real-time remote monitoring of small-scaled biological wastewater treatment plants by a multivariate statistical process control and neural network-based software sensors," *Process Biochemistry*, vol. 43, pp. 1107-1113, 10, 2008.
- [20] H. Cheng, M. Nikus and S. Jämsä-Jounela, "Evaluation of PCA methods with improved fault isolation capabilities on a paper machine simulator," *Chemometrics Intellig. Lab. Syst.*, vol. 92, pp. 186-199, 7/15, 2008.
- [21] M. R. Maurya, R. Rengaswamy and V. Venkatasubramanian, "Qualitative trend analysis of the principal components: Application to fault diagnosis," in *Computer Aided Chemical Engineering* Anonymous Elsevier, pp. 968-973.
- [22] N. A. Abd Majid, M. P. Taylor, J. J. J. Chen and B. R. Young, "Multivariate statistical monitoring of the aluminium smelting process," *Comput. Chem. Eng.*, vol. 35, pp. 2457-2468, 11/15, 2011.
- [23] J. Lee, C. Yoo and I. Lee, "Statistical process monitoring with independent component analysis," *J. Process Control*, vol. 14, pp. 467-485, 8, 2004.
- [24] J. Schimert, "Data-driven fault detection based on process monitoring using dimension reduction techniques," in *Aerospace Conference, 2008 IEEE*, 2008, pp. 1-12.

- [25] L. Wang and H. Shi, "Multivariate statistical process monitoring using an improved independent component analysis," *Chem. Eng. Res. Design*, vol. 88, pp. 403-414, 4, 2010.
- [26] J. Lee, B. Kang and S. Kang, "Integrating independent component analysis and local outlier factor for plant-wide process monitoring," *J. Process Control*, vol. 21, pp. 1011-1021, 8, 2011.
- [27] A. Routray, A. Rajaguru and S. Singh, "Data reduction and clustering techniques for fault detection and diagnosis in automobiles," in *Automation Science and Engineering (CASE)*, 2010 IEEE Conference on, 2010, pp. 326-331.
- [28] C. Hsu, M. Chen and L. Chen, "Intelligent ICA–SVM fault detector for non-Gaussian multivariate process monitoring," *Expert Syst. Appl.*, vol. 37, pp. 3264-3273, 4, 2010.
- [29] P. F. Odgaard, Bao Lin and S. B. Jorgensen, "Observer and Data-Driven-Model-Based Fault Detection in Power Plant Coal Mills," *Energy Conversion, IEEE Transactions on*, vol. 23, pp. 659-668, 2008.
- [30] M. J. Fuente, D. Garcia-Alvarez, G. I. Sainz-Palmero and T. Villegas, "Fault detection and identification method based on multivariate statistical techniques," in *Emerging Technologies & Factory Automation, 2009. ETFA 2009. IEEE Conference on*, 2009, pp. 1-6.
- [31] S. Klinkhieo and R. J. Patton, "PLS-based FDI of a three-tank laboratory system," in *Decision and Control, 2009 Held Jointly with the 2009 28th Chinese Control Conference. CDC/CCC 2009. Proceedings of the 48th IEEE Conference on*, 2009, pp. 1896-1901.
- [32] C. Lee, S. W. Choi and I. Lee, "Variable reconstruction and sensor fault identification using canonical variate analysis," *J. Process Control*, vol. 16, pp. 747-761, 8, 2006.
- [33] E. L. Russell, L. H. Chiang and R. D. Braatz, "Fault detection in industrial processes using canonical variate analysis and dynamic principal component analysis," *Chemometrics Intellig. Lab. Syst.*, vol. 51, pp. 81-93, 5/8, 2000.
- [34] P. P. Odiowei and Y. Cao, "Nonlinear dynamic process monitoring using canonical variate analysis and kernel density estimations," in *Computer Aided Chemical Engineering* Anonymous Elsevier, pp. 1557-1562.
- [35] B. C. Juricek, D. E. Seborg and W. E. Larimore, "Process control applications of subspace and regression-based identification and monitoring methods," in *American Control Conference, 2005. Proceedings of the 2005*, 2005, pp. 2341-2346 vol. 4.

- [36] S. Theodoridis and K. Koutroumbas, Pattern Recognition. United States of America: Academic Press, 2009.
- [37] R. Srinivasan, P. Viswanathan, H. Vedam and A. Nochur, "A framework for managing transitions in chemical plants," *Comput. Chem. Eng.*, vol. 29, pp. 305-322, 1/15, 2005.
- [38] A. Sundarraman and R. Srinivasan, "Monitoring transitions in chemical plants using enhanced trend analysis," *Comput. Chem. Eng.*, vol. 27, pp. 1455-1472, 10/15, 2003.
- [39] L. M. R. Baccarini, V. V. Rocha e Silva, B. R. de Menezes and W. M. Caminhas, "SVM practical industrial application for mechanical faults diagnostic," *Expert Syst. Appl.*, vol. 38, pp. 6980-6984, 6, 2011.
- [40] I. Yélamos, G. Escudero, M. Graells and L. Puigjaner, "Fault diagnosis based on support vector machines and systematic comparison to existing approaches," in *Computer Aided Chemical Engineering* Anonymous Elsevier, pp. 1209-1214.
- [41] K. Salahshoor, M. Kordestani and M. S. Khoshro, "Fault detection and diagnosis of an industrial steam turbine using fusion of SVM (support vector machine) and ANFIS (adaptive neuro-fuzzy inference system) classifiers," *Energy*, vol. 35, pp. 5472-5482, 12, 2010.
- [42] L. M. R. Baccarini, V. V. Rocha e Silva, B. R. de Menezes and W. M. Caminhas, "SVM practical industrial application for mechanical faults diagnostic," *Expert Syst. Appl.*, vol. 38, pp. 6980-6984, 6, 2011.
- [43] A. Widodo and B. Yang, "Wavelet support vector machine for induction machine fault diagnosis based on transient current signal," *Expert Syst. Appl.*, vol. 35, pp. 307-316, 0, 2008.
- [44] T. Marcu, B. Köppen-Seliger and R. Stücher, "Design of fault detection for a hydraulic looper using dynamic neural networks," *Control Eng. Pract.*, vol. 16, pp. 192-213, 2, 2008.
- [45] M. J. Fuente and P. Vega, "Neural networks applied to fault detection of a biotechnological process," *Eng Appl Artif Intell*, vol. 12, pp. 569-584, 10, 1999.
- [46] K. Zhang, Y. Li, P. Scarf and A. Ball, "Feature selection for high-dimensional machinery fault diagnosis data using multiple models and Radial Basis Function networks," *Neurocomputing*, vol. 74, pp. 2941-2952, 10, 2011.
- [47] H. Demuth and M. Beale, *Neural Network Toolbox: For Use with MATLAB*. The MathWorks, Inc., Natick, Massachusetts, 2001.

- [48] Y. T. Hong, M. R. Rosen and R. Bhamidimarri, "Analysis of a municipal wastewater treatment plant using a neural network-based pattern analysis," *Water Res.*, vol. 37, pp. 1608-1618, 4, 2003.
- [49] H. López García and I. Machón González, "Self-organizing map and clustering for wastewater treatment monitoring," *Eng Appl Artif Intell*, vol. 17, pp. 215-225, 4, 2004.
- [50] S. -. Jämsä-Jounela, M. Vermasvuori, P. Endén and S. Haavisto, "A process monitoring system based on the Kohonen self-organizing maps," *Control Eng. Pract.*, vol. 11, pp. 83-92, 1, 2003.
- [51] C. W. Chan, H. Jin, K. C. Cheung and H. Y. Zhang, "Fault detection of systems with redundant sensors using constrained Kohonen networks," *Automatica*, vol. 37, pp. 1671-1676, 10, 2001.
- [52] P. Teppola, S. Mujunen and P. Minkkinen, "Adaptive Fuzzy C-Means clustering in process monitoring," *Chemometrics Intellig. Lab. Syst.*, vol. 45, pp. 23-38, 1/18, 1999.
- [53] Fuzzy Logic Toolbox: For Use with MATLAB. The MathWorks, Inc., Natick, Massachusetts, 2008.
- [54] D. Hu, A. Sarosh and Y. Dong, "A novel KFCM based fault diagnosis method for unknown faults in satellite reaction wheels," *ISA Trans.*, vol. 51, pp. 309-316, 3, 2012.
- [55] Z. Xue, Y. Shang and A. Feng, "Semi-supervised outlier detection based on fuzzy rough C-means clustering," *Math. Comput. Simul.*, vol. 80, pp. 1911-1921, 5, 2010.
- [56] C. T. Yiakopoulos, K. C. Gryllias and I. A. Antoniadis, "Rolling element bearing fault detection in industrial environments based on a K-means clustering approach," *Expert Syst. Appl.*, vol. 38, pp. 2888-2911, 3, 2011.
- [57] S. Y. Kung, M. W. Mak and S. H. Lin, *Biometric Authentication*, New Jersey: Prentice-Hall, 2005.
- [58] X. Wu, V. Kumar, Ed., *The Top Ten Algorithms in Data Mining*, Boca Raton: Chapman & Hall/CRC, 2009.
- [59] Caso de estudio, Two Stage Process Model, Instrumentación y Control de Procesos, Marco E. Sanjuan, Universidad Del Norte, 2008.
- [60] G. E. P. Box, G. M. Jenkins and G. C. Reinsel, *Time Series Analysis*, 3rd ed. New Jersey: Prentice-Hall, 1944.

[61] M. Sanjuan, A. Kandel and C. A. Smith, "Design and implementation of a fuzzy supervisor for on-line compensation of nonlinearities: An instability avoidance module," Eng Appl Artif Intell, vol. 19, pp. 323-333, 4, 2006.

Anexo

En la Figura A1 se muestra un sistema integrado por un Tanque Calentador Continamente Agitado (CSTH) y un Reactor Exotérmico, el cual demanda que el reactivo al ingresar posea una ganancia alta de calor dada la ausencia de un componente catalizador para la generación completa del producto.

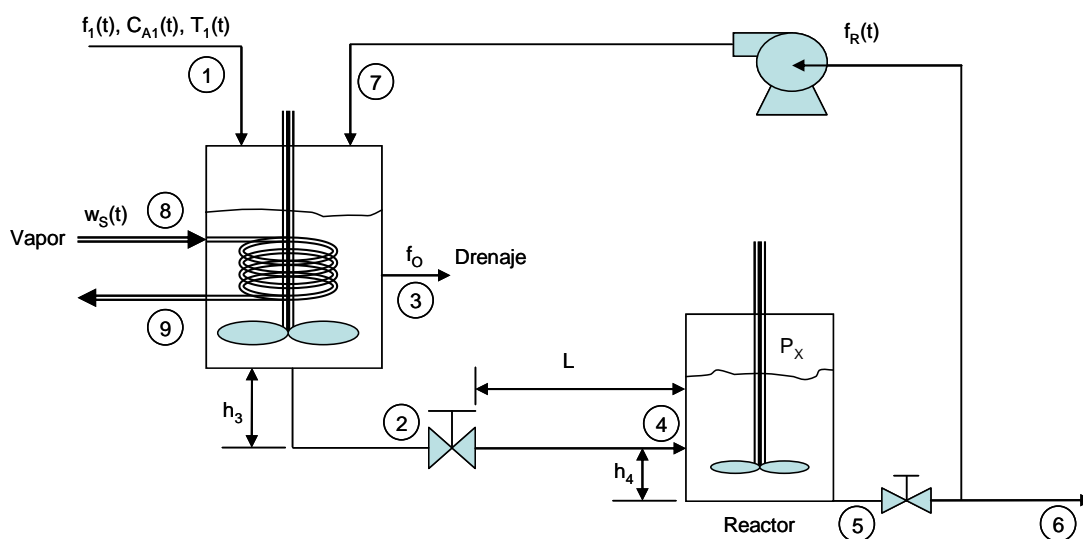


Figura A1. Sistema en estudio.

Gracias a la implementación del CSTH es posible pre-mezclar los componentes y conseguir una mezcla uniforme. La transferencia de energía en forma de calor en su interior está dado por la circulación de vapor saturado a través del serpentín; describiéndose en el modelo matemático de pared gruesa (capacitancia térmica).

En la Tabla A1 se consignan los valores de los parámetros de operación del sistema para su descripción matemática y se especifican aquellas posibles interacciones que presentase en él pero que no se consideran en la descripción del modelo, como es el caso de las hipótesis que se relacionan a continuación:

- Mezclado ideal.
- Pérdidas de calor despreciable.
- No hay reacción química al interior del CSTH.
- Las variaciones en la densidad y el calor específico con la temperatura no son significativas.

- El sistema se encuentra aislado térmicamente del medio que lo rodea.
- No se presentan gradientes de temperatura o de concentración al interior de los tanques.
- Las propiedades físicas y químicas de la entrada del sistema son idénticas al interior de cada implementación en el sistema (CSTH y Reactor Exotérmico).

Tabla A1. Parámetros de operación del sistema de Figura A1.

Parámetros	Valor	Unidades	Parámetros	Valor	Unidades
Área del tanque (CSTH)	80	ft^2	C_{v2}	20.5	$\frac{ft^3/min}{\sqrt{psi}}$
Área del reactor	60	ft^2	α_1	2.4	$\frac{lbm}{lbmoleA}$
Área del serpentín	400	ft^2	α_2	1.2	$\frac{lbm}{lbmoleB}$
Área de la tubería	0.1	ft^2	α_3	1.8	$\frac{lbm}{lbmoleC}$
Presión atmosférica	14.7	psi	k_0	1.14×10^{10}	$\frac{1}{ft^3 lbmoleA min}$
P_x	18	psi	E	27830	$\frac{BTU}{lbmole}$
h_3	3	ft	R	1.987	$\frac{BTU}{lbmole \text{ } ^\circ R}$
h_4	2	ft	L_1	120	ft
ρ_{agua}	62.4	$\frac{lbm}{ft^3}$	U	5.1	$\frac{BTU}{ft^2 \text{ } ^\circ F}$
ρ_0	66	$\frac{lbm}{ft^3}$	ΔH_r	-1200	$\frac{BTU}{lbmole}$
C_{v1}	35.6	$\frac{ft^3/min}{\sqrt{psi}}$			

De acuerdo a lo anterior se presentan a través del conjunto de ecuaciones (A1-A23) el comportamiento dinámico del sistema de control:

A.1. Balance de masa

A.1.1. Balance de masa en el CSTH

$$f_1(t)\rho_1(t) + f_R(t)\rho_5 - f_0(t)\rho_2(t) - f_2(t)\rho_2(t) = A_{TK} \frac{d}{dt} [\rho_2(t)h(t)] \quad (A1)$$

1 ecuación, 5 incógnitas {1,5}; $\rho_1(t)$, $\rho_2(t)$, $\rho_5(t)$, $f_2(t)$, $h(t)$

A.1.2. Balance de masa en el reactor

$$f_2(t)\rho_4(t) - f_5(t)\rho_5(t) = A_{RX} \frac{d}{dt}[\rho_5(t)h_2(t)] \quad (A2)$$

2 ecuaciones, 8 incógnitas {2,8}; $\rho_4(t)$, $f_5(t)$, $h_2(t)$

A.2. Balance molar

A.2.1. Balance molar de A en el CSTH

$$f_1(t)C_{A1}(t) + f_R(t)C_{A5}(t) - f_0(t)C_{A2}(t) - f_2(t)C_{A2}(t) = A_{TK} \frac{d}{dt}[C_{A2}(t)h(t)] \quad (A3)$$

3 ecuaciones, 10 incógnitas {3,10}; $C_{A2}(t)$, $C_{A5}(t)$

A.2.1. Balance molar de B en el CSTH

$$f_R(t)C_{B5}(t) - f_0(t)C_{B2}(t) - f_2(t)C_{B2}(t) = A_{TK} \frac{d}{dt}[C_{B2}(t)h(t)] \quad (A4)$$

4 ecuaciones, 12 incógnitas {4,12}; $C_{B2}(t)$, $C_{B5}(t)$

A.2.2. Balance molar de C en el CSTH

$$f_R(t)C_{C5}(t) - f_0(t)C_{C2}(t) - f_2(t)C_{C2}(t) = A_{TK} \frac{d}{dt}[C_{C2}(t)h(t)] \quad (A5)$$

5 ecuaciones, 14 incógnitas {5,14}; $C_{C2}(t)$, $C_{C5}(t)$

A.2.3. Balance molar de A en el reactor

$$f_2(t)C_{A4}(t) - f_5(t)C_{A5}(t) - \frac{1}{2}r_B(t)A_{RX}h_2(t) = A_{RX} \frac{d}{dt}[C_{A5}(t)h_2(t)] \quad (A6)$$

6 ecuaciones, 16 incógnitas {6,16}; $C_{A4}(t)$, $r_B(t)$

A.2.4. Balance molar de B en el reactor

$$f_2(t)C_{B4}(t) - f_5(t)C_{B5}(t) + r_B(t)A_{RX}h_2(t) = A_{RX} \frac{d}{dt}[C_{B5}(t)h_2(t)] \quad (A7)$$

7 ecuaciones, 17 incógnitas {7,17}; $C_{B4}(t)$

A.2.5. Balance molar de C en el reactor

$$f_2(t)C_{C4}(t) - f_5(t)C_{C5}(t) + \frac{1}{2}r_B(t)A_{RX}h_2(t) = A_{RX} \frac{d}{dt}[C_{C5}(t)h_2(t)] \quad (A8)$$

8 ecuaciones, 18 incógnitas {8,18}; $C_{C4}(t)$

A.3. Balance de energía

A.3.1. Balance de energía en el CSTH

$$f_1(t)\rho_1(t)T_1(t)C_p + f_R(t)\rho_5(t)T_5(t)C_p - f_0(t)\rho_2(t)T_2(t)C_p - f_2(t)\rho_2(t)T_2(t)C_p \quad (A9) \\ + U_0 A_{serpent\ in} [T_{serpent\ in}(t) - T_2(t)] = A_{TK} C_V \frac{d}{dt} [\rho_2(t)T_2(t)h(t)]$$

9 ecuaciones, 21 incógnitas {9,21}; $T_2(t), T_5(t), T_{serpent\ in}(t)$

A.3.2. Balance de energía en el serpentín

$$w(t)\lambda - U_0 A_{serpent\ in} [T_{serpent\ in}(t) - T_2(t)] = C_{serpent\ in} \frac{d}{dt} [T_{serpent\ in}(t)] \quad (A10)$$

10 ecuaciones, 21 incógnitas {9,21}

A.3.3. Balance de energía en el reactor

$$f_2(t)\rho_4(t)T_4(t)C_p - f_5(t)\rho_5(t)T_5(t)C_p + \Delta H_{RB} r_B(t) A_{RX} h_2(t) \quad (A11) \\ = A_{RX} C_V \frac{d}{dt} [\rho_5(t)T_5(t)h_2(t)]$$

11 ecuaciones, 22 incógnitas {11,22}; $T_4(t)$

A.4. Modelos de densidad

A.4.1. Modelo de densidad para f_1

$$\rho_1(t) = \rho_0 + \alpha_1 C_{A1}(t) \quad (A12)$$

12 ecuaciones, 22 incógnitas {12,22}

A.4.2. Modelo de densidad para f_R

$$\rho_5(t) = \rho_0 + \alpha_1 C_{A5}(t) + \alpha_2 C_{B5}(t) + \alpha_3 C_{C5}(t) \quad (A13)$$

13 ecuaciones, 22 incógnitas {13,22}

A.4.3. Modelo de densidad para f_2

$$\rho_2(t) = \rho_0 + \alpha_1 C_{A2}(t) + \alpha_2 C_{B2}(t) + \alpha_3 C_{C2}(t) \quad (A14)$$

14 ecuaciones, 22 incógnitas {14,22}

A.5. Tasa de reacción

$$r_B(t) = k_0 C_{A5}(t) C_{B5}(t) e^{-\frac{E}{R T_5(t)}} \quad (A15)$$

15 ecuaciones, 22 incógnitas {15,22}

A.6. Modelos de válvulas

A.6.1. Modelo válvula 1

$$f_2(t) = C_{VA} \sqrt{\frac{P_0 + \rho_2(t)[h(t) + hh_3] - \rho_R(t)[h_2(t) - hh_4] - P_x}{\frac{\rho_2(t)}{\rho_w}}} \quad (A16)$$

16 ecuaciones, 22 incógnitas {16,22}

A.6.2. Modelo válvula 2

$$f_5(t) = C_{VA} \sqrt{h_2(t) + \alpha P_x} \quad (A17)$$

17 ecuaciones, 22 incógnitas {18,22}

A.7. Retrasos por transporte

A.7.1. Retraso por transporte de T_4

$$T_4(t) = T_2(t - t_0(t)) \quad (A18)$$

18 ecuaciones, 23 incógnitas {18,23}; $t_0(t)$

A.7.2. Retraso por transporte de C_{A4}

$$C_{A4}(t) = C_{A2}(t - t_0) \quad (A19)$$

19 ecuaciones, 23 incógnitas {19,23}

A.7.3. Retraso por transporte de C_{B4}

$$C_{B4}(t) = C_{B2}(t - t_0) \quad (A20)$$

20 ecuaciones, 23 incógnitas {20,23}

A.7.4. Retraso por transporte de C_{C4}

$$C_{C4}(t) = C_{C2}(t - t_0) \quad (A21)$$

21 ecuaciones, 23 incógnitas {21,23}

A.7.5. Retraso por transporte de ρ_4

$$\rho_4(t) = \rho_2(t - t_0) \quad (A22)$$

22 ecuaciones, 23 incógnitas {22,23}

A.8. Tiempo de retardo

$$t_0(t) = \frac{L A_{pipe}}{f_2(t)} \quad (A23)$$

23 ecuaciones, 23 incógnitas {23,23}